OPTIMALE VERSUCHSPLANUNG BEI MODELLEN DER KOVARIANZANALYSE MIT LINEAREN REGRESSIONSFAKTOREN

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Georg-August-Universität in Göttingen

vorgelegt von
Jürgen Köster
aus Brake

Göttingen 1976

OPTIMALE VERSUCHSPLANUNG BEI MODELLEN DER KOVARIANZANALYSE MIT LINEAREN REGRESSIONSFAKTOREN

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Georg-August-Universität in Göttingen

vorgelegt von
Jürgen Köster
aus Brake

Göttingen 1976

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

D 7
Referent: Prof.Dr. Viktor G. Kurotschka
Korreferent: Prof.Dr. André Antille
Tag der mündlichen Prüfung: 17.12.1976

Inhalt

Seite

Einleitung..... 1

§ 1. Versuchsplanung in Modellen der Kovarianzanalyse 1

§ 1.1. Kovarianzmodelle und zugehörige Versuchspläne... 1

§ 1.2. Optimalitätskriterien und Parametrisierung..... 9

§ 2. Charakterisierung optimaler Versuchspläne für den Regressionsparameter in Kovarianzmodellen... 18

§ 2.1. Das Problem der Versuchsplanung für den Regressionsparameter β_2..... 18

§ 2.2. Darstellung der Informationsmatrizen für β_2 zu den Kovarianzmodellen mit $K_1=1,2$..... 20

§ 2.3. Optimale Versuchspläne für den Regressionsparameter in $\Delta(N_1,N_2,[-1,+1]^k)$ und $\Delta(N,[-1,+1]^k)$ $(k=1,2)$..... 22

§ 2.4. Optimale Versuchspläne für den Regressionsparameter in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,[-1,+1])$ und $\bar{\Delta}(N,[-1,+1])$..... 34

§ 2.5. Optimale Versuchspläne in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,[-1,+1]^{K_2})$ für β_2 bei $I_1=2$..... 50

§ 3. Charakterisierung optimaler Versuchspläne für den ANOVA-Parameter in Kovarianzmodellen..... 60

§ 3.1. Allgemeine Problemstellung der Versuchsplanung für den ANOVA-Parameter β_1..... 60

§ 3.2. Optimale Versuchspläne für β_1 in $\Delta(N_1,N_2,\{-1,+1\}^k)$ und $\Delta(N,\{-1,+1\}^k)(k=1,2)$ unter Ganzzahligkeitsvoraussetzung..... 63

§ 3.3. Optimale Versuchspläne für β_1 in $\bar{\Delta}(N_1,N_2\{-1,+1\})$ und $\bar{\Delta}(N,\{-1,+1\})$..... 74

Schlußbemerkungen..... 93

Literatur..... 95

Einleitung

In der vorliegenden Arbeit wird ein Aspekt der Versuchsplanung in linearen Modellen untersucht. Das zugrundegelegte Modell der Kovarianzanalyse setzt sich aus einem varianzanalytischen Modell mit K_1 Faktoren und einem Regressionsmodell mit K_2 Faktoren zusammen, wobei die Regressionsfaktoren als linear unabhängig vorausgesetzt sind. Die Menge T der Versuchseinstellungen ist enthalten in $\mathbb{N}^{K_1} \times \mathbb{R}^{K_2}$. Wegen der Bedeutung zweifach klassifizierter Beobachtungsmodelle der Varianzanalyse und linearer Regressionsanteile bei Kovarianzmodellen (Cox [3], de Lury [12], Rao [13]) werden hier Modelle mit $K_1 \leq 2$, $K_2 \leq 2$ betrachtet.

Die Definition der Modelle und der zugehörigen Versuchspläne werden in § 1.1. in sehr allgemeiner Form durchgeführt. Die interessierenden statistischen Fragestellungen an die in Kovarianzmodellen schätzbaren Funktionale sowie die über die Informationsmatrizen definierten Kriterien zur Auswahl von Versuchsplänen geben wir in § 1.2. an. In Matrixschreibweise erhalten wir die Darstellung

$$E_\theta\, X(d) = A_1^T(d)\ \beta_1(\theta) + A_2^T(d)\ \beta_2(\theta)$$

des Kovarianzmodells mit den Planungsmatrizen $A_1(d)$ für den varianzanalytischen Anteil und $A_2(d)$ für das korrespondierende Regressionsmodell zum Versuchsplan d, der sich aus der Matrix $N_{12\ldots K_1}$ der Beobachtungszahlen und den Matrizen

der Kovariaten $S_{12\ldots K_1} = (S^{(l)}_{12\ldots K_1}, l=1,\ldots,K_2)$ zusammensetzt:

$$d = (N_{12\ldots K_1}, S_{12\ldots K_1})$$

Durch die Parametrisierung und Normierung des Modells erreichen wir, daß die interessierenden Funktionale selbst als Parametrisierung auftreten. Daher werden die Versuchsplanungsprobleme für den Regressionsparameter β_2 (in § 2.) und den Parameter β_1 (in § 3.) des varianzanalytischen Anteils (ANOVA-Parameter) untersucht. Hierbei unterscheiden wir zwei Klassen von Versuchsplänen Δ und $\bar{\Delta}$. Im Gegensatz zu $\bar{\Delta}$ können die $N(t_1)$ Kovariaten in Δ bei fester Versuchseinstellung $t_1 \in T_1$ verschiedene Werte in T_2 annehmen.

In § 2.2. geben wir die Informationsmatrizen für den Regressionsparameter in Δ und $\bar{\Delta}$ an. Bei der Charakterisierung optimaler Versuchspläne in Δ (bzw. $\bar{\Delta}$) für $K_2 = 1$, die in § 2.3. und § 2.4. durchgeführt wird, geht wesentlich Lemma 2.3.1. ein, durch welches sich das Versuchsplanungsproblem in Δ bzw. $\bar{\Delta}$) auf eine Untersuchung in der vollständigen Klasse Δ' (bzw. $\bar{\Delta}'$) reduziert. Während in § 2.3. die Forderung der Ganzzahligkeit auf kombinatorische Überlegungen bei der Bestimmung optimaler Versuchspläne führt, basiert der Beweis des Hauptsatzes 2.4.4. von § 2.4. im wesentlichen auf einem Lagrangeansatz, wie er für Satz 2.4.2. in einem zweistufigen Modell mit $K_1 = 2$, $K_2 = 1$ gemacht wurde, und dem technischen Lemma 2.4.2., in welchem Funktionenklassen untersucht werden, deren Elemente sich als Quotienten des Produkts

und der Summe zweier konkaver reellwertiger Funktionen schreiben lassen.

Die Ergebnisse von § 2. entsprechen der Vorstellung: Aufteilung der Kovariaten in Δ pro Versuchseinheit und größtmögliche Trennung in T_2. In $\bar{\Delta}$ führt ein Lagrangeansatz auf Teilproportionalität innerhalb von 4 Teilmatrizen von N_{12}:

$$N_{12} = \begin{pmatrix} N_{12}^{(1)} & N_{12}^{(2)} \\ N_{12}^{(3)} & N_{12}^{(4)} \end{pmatrix} \qquad \text{mit}$$

$$N(i_1,i_2) \in N_{12}^{(i)} \Rightarrow N(i_1,i_2) = c(i)\ N_1(i_1)N_2(i_2)/N$$

$$i=1,\ldots,4, \quad i_k=1,\ldots,I_k, \quad k=1,2$$

Zur Lösung des Versuchsplanungsproblems für β_1 ist ein anderer grundsätzlicher Ansatz als in § 2. notwendig, da sich bei vorausgesetztem Determinantenkriterium die Optimierung in Δ und $\bar{\Delta}$ auf die Lösung des Versuchsplanungsproblems für ein rein varianzanalytisches Modell reduzieren ließe, falls keine zusätzliche Forderung an die Matrix der Kovariaten $S_{12\ldots K_1}$ gestellt wird. Unter Beachtung von Lemma 2.3.1. erweist sich die Voraussetzung

$$S_{12\ldots K_1}^{(l)} \in \{-1,+1\}^N \qquad l=1,\ldots,K_2$$

als sinnvoll, und damit gelangen wir zu den in Satz 3.2.1. und 3.2.2. angegebenen Versuchsplänen mit ganzzahligen Be-

obachtungshäufigkeiten.

Die mathematischen Probleme der Versuchsplanung für den ANOVA Parameter β_1 liegen in der Verwendung des Determinantenkriteriums. Die Berechnung von det $I_{\beta_1}(d)$ ist wegen

$$\text{rg } I_{\beta_1}(d) = I_1 + I_2 - 1 \qquad \text{für } K_1 = 2,\ K_2 = 1$$

$$\text{rg } I_{\beta_2}(d) \leq 2 \qquad \text{für } K_1 \leq 2,\ K_2 \leq 2$$

aufwendiger.

Die Bedeutung proportionaler Versuchspläne für die Kovarianzanalyse wird durch diese Sätze unterstrichen.

Eine Abweichung der D_{β_1}-optimalen Versuchspläne in $\bar{\Delta}$ von den proportionalen in Abhängigkeit von der Anzahl der Stufen der einzelnen Faktoren (qualitativen) wird in § 3.3. bewiesen und durch Beispiele illustriert. Der Charakterisierungssatz 3.3.2. gibt an, wie man durch die Lösung einer kubischen Gleichung hinreichende Bedingungen für die D_{β_1}-Optimalität von Versuchsplänen erhält.

Mit Hilfe des Newtonschen Iterationsverfahrens, das als Subroutine bei EDV-Anlagen i.a. verfügbar ist, lassen sich die in § 2.4. und § 3.3. notwendigen Berechnungen für die Nullstellen der Polynome der Bedingungsgleichungen leicht durchführen. Die spezielle Proportionalität der Beobachtungszahlen, d.h. $N(i,j) = c(A,B)N_1(i)N_2(j)$ mit $A \subset \mathbb{N}_{I_1}$, $B \subset \mathbb{N}_{I_2}$ für $(i,j) \in A \times B$, erleichtert die weitere Berechnung des Versuchsplans. Eine Anwendung der Aussagen der Sätze

2.3.3., 2.4.4., 3.2.2., 3.3.2. ist im Anschluß an die Charakterisierungssätze in § 2.4. und § 3.3. durch Beispiele demonstriert. Wir finden in $\bar{\Delta}$ ganzzahlige Versuchspläne für β_1 und β_2, die besser als die proportionalen sind. Weiterhin zeigen wir, daß bei großer Anzahl von Stufen qualitativer Faktoren optimale Versuchspläne in Δ durch einfachere und kostengünstigere in $\bar{\Delta}$ ohne Verlust von Güte ersetzt werden können.

Die Ergebnisse von § 3.2. mit $K_1 = 1$ lassen sich mit Ergebnissen von Harville [6] über Kovarianzmodelle mit linearer Regression vergleichen, obgleich in dieser Arbeit ein allgemeinerer Ansatz zugrunde gelegt wurde, indem die Kovariaten als nicht gegeben vorausgesetzt werden.

Ich möchte Herrn Professor Kurotschka danken für die Anregung zu dieser Arbeit und sein Interesse sowie die wertvollen Ratschläge während des Entstehens dieser Arbeit.

§ 1. Versuchsplanung in Modellen der Kovarianzanalyse

§ 1.1. Kovarianzmodelle und zugehörige Versuchspläne

Sei T eine Menge von realisierbaren Versuchseinstellungen eines statistischen Experiments, die sich in folgender Weise darstellen läßt:

$$T = T_1 \times T_2 = \prod_{k=1}^{K_1} \{1,2,\ldots,I\} \times C$$

$C \subset \mathbb{R}^{K_2}$ zusammenhängend und kompakt

Die Gesamtzahl der beim Experiment auftretenden Einflußfaktoren $K := K_1 + K_2$ setzt sich aus K_1- qualitativen und K_2-quantitativen Faktoren zusammen. Häufig wird $C = T_2$ von der Form

$$C = \prod_{k=1}^{K_1} [a_k, b_k] \qquad a_k > b_k \qquad (k=1,\ldots,K_2)$$

sein. Eine Versuchseinstellung $t \in T$ ist in dem Fall ein $1 \times (K_1+K_2)$ Vektor

$$t = (t_1,t_2) = (i_1,\ldots,i_{K_1}, s^{(1)}(t_1),\ldots,s^{(K_2)}(t_1))$$

$$i_k=1,\ldots,I_k,\ k=1,\ldots,K_1$$

$$s^{(j)}(t_1) \in [a_j,b_j]\ j=1,\ldots,K_2$$

Dabei bezeichnet i_k die i_k-te Wirkungsstufe des k-ten qualitativen Faktors $(k=1,\ldots,K_1)$, analog $s^{(j)}$ die j-te

Wirkungsstufe des j-ten quantitativen Faktors.

Allgemein liegt ein lineares Beobachtungsmodell unseren Betrachtungen zugrunde und zwar ein Modell der Kovarianzanalyse.

Sei $T \ni t \to X(t) : (\Omega, A, P_\theta) \to (\mathbb{R}, \mathcal{B}, P_\theta^X)$ $\theta \in \Theta$, $P_\theta \in \mathcal{P}$ ein lineares Beobachtungsmodell in $\beta = (\beta_1, \ldots, \beta_p)^T$:
d.h. $\exists\, \underline{a} = (\underline{a}_1, \underline{a}_2) : T \ni t \to \underline{a}(t) = (\underline{a}_1(t), \underline{a}_2(t)) \in \{0,1\}^{p_1} \times \mathbb{R}^{p_2}$ derart, daß

$$E_\theta X(t) = E_\theta X(t_1, t_2) = \mu(t_1, t_2, \theta) = \underline{a}^T(t)\, \beta(\theta) =$$

$$= \underline{a}_1^T(t)\, \beta_1(\theta) + \underline{a}_2^T(t)\, \beta_2(\theta) =$$

$$= \underline{a}_1^T(i_1, \ldots, i_{K_1})\, \beta_1(\theta) + \underline{a}_2^T((s^{(1)}, \ldots, s^{(K_2)})_{(i_1, \ldots, i_{K_1})})\, \beta_2(\theta)$$

$\underline{a}_{11}(t), \ldots, \underline{a}_{1p_1}(t)$, $\underline{a}_{21}(t), \ldots, \underline{a}_{2p_2}(t)$ sind die Regressionsfunktionen, als bekannt vorausgesetzte stetige Funktionen: $\underline{a}_{1i} : T \to \{0,1\}$, $\underline{a}_{2i} : T \to \mathbb{R}$

$\beta_{11}(\theta), \ldots, \beta_{1p_1}(\theta)$, $\beta_{21}(\theta), \ldots, \beta_{2p_2}(\theta)$ sind die unbekannten Parameter des Modells mit
$\beta = (\beta_1, \beta_2) \in \mathbb{R}^{p_1} \times \mathbb{R}^{p_2}$

Wir setzen gleiche Beobachtungsgenauigkeit voraus:

$$\mathrm{Var}_\theta X(t) = \sigma^2$$

Beispiel:

Sei $K_1 = 2$, $K_2 = 1$

$T = \{1, \ldots, I_1\} \times \{1, \ldots, I_2\} \times [a,b]$

$t = (t_1, t_2) = (i_1, i_2, s(i_1, i_2))$

$$\underline{a}_1(t_1)=(1,1_{\{i_1=1\}}(t_1),\ldots,1_{\{i_1=I_1\}}(t_1),1_{\{i_2=1\}}(t_1),\ldots 1_{\{i_2=I_2\}}(t_1)$$

$$1_{\{(i_1,i_2)=(1,1)\}}(t_1),\ldots,1_{\{(i_1,i_2)=(I_1,I_2)\}}(t_1))^T$$

$$\underline{a}_2(t_2) = \underline{a}_{21}(t_2(t_1)) = id_{T_2}(t_2(t_1)) = t_2(t_1) = s(i_1,i_2)$$

mit $\beta_1(\theta) = (\mu,a_{11}(1),..,a_{11}(I_1),..,a_{13}(1,1),\ldots,a_{13}(I_1,I_2))^T$

$$\beta(\theta) = a_{21}$$

betrachten wir ein zweifach-klassifiziertes Modell der Varianzanalyse kombiniert mit einem eindimensionalen Regressionsmodell.

$$\begin{aligned} E_\theta X(t) = E_\theta X(t_1,t_2) &= \mu + a_{11}(i_1) + a_{12}(i_2) + a_{13}(i_1,i_2) \\ &\quad + a_{21}s(i_1,i_2) \\ &= \underline{a}_1^T(i_1,i_2)\ \beta_1(\theta) + \underline{a}_2^T(s(i_1,i_2))\beta_2(\theta) \\ &= a^*_1(t_1) + a^*_2(t_2(t_1)) \end{aligned}$$

Ein Versuchsplan d zu einer Menge zugelassener Versuchseinstellungen T ist ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf T. Im diskreten Falle ist d ein Punktmaß, welches einer Kollektion von Punkten (t(i) $\in$ T, i=1,...,I) die Wahrscheinlichkeiten (p(i), i=1,...,I) zuordnet mit

$$p(i) = N(i)/N \qquad i=1,\ldots,I$$

wobei N(i) die Anzahl der Beobachtungen des zum Versuchsplan zugehörigen Experiments bei der Versuchseinstellung t(i) ist, während N die Gesamtbeobachtungsanzahl angibt mit

$$N = \sum_{i=1}^{I} N(i)$$

Damit läßt sich d darstellen als System

$$d = \begin{pmatrix} t(1) & \dots & t(I) \\ N(t(1)) & \dots & N(t(I)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (t_1,t_2)(1) & \dots & (t_1,t_2)(I) \\ N(t_1(1)) & \dots & N(t_1(I)) \end{pmatrix} \quad t\in T \quad (1.1)$$

Die Beobachtungshäufigkeit für $t = (t_1,t_2)$ wird durch t_1 bereits festgelegt. Zu t_1 werden $N(t_1)$ Beobachtungen durchgeführt, dabei erlauben wir, daß die Kovariaten t_2 bei den einzelnen Wiederholungen der Versuchseinstellung t_1 variieren dürfen, d.h. $(t_1,t_2)(i)$ ist ein $N(t_1(i))$-dimensionaler Vektor mit der j-ten Komponente

$$(t_1,t_2)(i)_j = (i_1,\dots,i_{K_1},s_j^{(1)}(i_1,\dots,i_{K_1}),\dots,s_j^{(K_2)}(i_1,\dots,i_{K_1}))$$

Eine zu (1.1) äquivalente Darstellung ist daher:

(I) $N_{12\dots K_1} := ((N(i_1,\dots,i_{K_1}))_{i_k=1,\dots,I_k,\ k=1,\dots,K_1}^{K_1})$

eine $I_1\times\dots\times I_{K_1}$-Matrix mit $I = \sum_{k=1}^{K_1} I_k$

(II)

$S_{12\dots K_1}^{J} := (S_{12\dots K_1}^{(1)},\dots,S_{12\dots K_1}^{(K_2)})$ mit der

$\prod_{i_k=1}^{I_k} N(i_1,i_2,\dots,i_{K_1})$-Matrix $S_{12\dots K_1}^{(1)} := ((s_j^{(1)}(i_1,\dots,i_{K_1})),$

$1\le k\le K_1$ $\qquad i_k=1,..,I_k,k=1,..,K_1$

$\qquad j=0,1,..,N(i_1,\dots,i_{K_1}))$

Im folgenden werden wir also die Versuchspläne mit

$$d = (N_{12..K_1}, S_{12..K_1}) = (N_{12..K_1}, (S^{(1)}_{12..K_1}, l=1,...,K_2))$$

bezeichnen.

Da Beschränkungen des Beobachtungsmaterials oft in einer der Klassen-Verfügbarkeit neuer Materialien - vorliegen oder sich auf die Gesamtbeobachtungszahl beziehen - vorgegebene Gesamtkosten des Experiments - werden Klassen von Versuchsplänen mit Restriktionen an die Beobachtungshäufigkeiten aufgeführt. Das ist insbesondere deshalb sinnvoll, da sich statistische Verfahren durch Vergrößerung der Stichprobenumfänge (Konsistenz) verbessern lassen.

$$\Delta(N) = \{N_{12..K_1} : \sum_{\substack{i_k=1 \\ 1\le k\le K_1}}^{I_k} N(i_1,...,i_{K_1}) = N\}$$

$$\Delta(N_1,...,N_{K_1}) = \{N_{12..K_1} : \sum_{\substack{i_k=1 \\ 1\le l\ne k\le K_1}}^{I_k} N(i_1,...,i_{K_1}) = N_1(i_1)\}$$

$$\Delta(N,[-1,+1]^{K_2}) = \{d=(N_{12..K_1}, S_{12..K_1}) : N_{12..K_1} \in \Delta(N),$$
$$s^{(1)}_j(i_1,..,i_{K_1}) \in [-1,+1], i_k=1,...,I_k, k=1,..,K_1$$
$$l=1,...,K_2, j=0,1,..,N(i_1,...,i_{K_1})\}$$

$$\Delta(N_1,..,N_{K_1},[-1,+1]^{K_2}) = \{d\in\Delta(N,[-1,+1]^{K_2}) : N_{12..K_1} \in \Delta(N_1,..,N_{K_1})\}$$

$$\bar{\Delta}(N,[-1,+1]^{K_2}) = \{d\in\Delta(N,[-1,+1]^{K_2}) : s^{(1)}_j(.) = s^{(l)}(.), l=1,..,K_2\}$$

$$\bar{\Delta}(N_1,..,N_{K_1},[-1,+1]^{K_2}) = \{d\in\bar{\Delta}(N,[-1,+1]^{K_2}) : N_{12..K_1} \in$$
$$\Delta(N_1,...,N_{K_1})\}$$

Dem Versuchsplan d wird ein N-dimensionaler Vektor X_d zugeordnet, der die Beobachtungen des Kovarianzmodells in lexikographischer Anordnung auflistet.

$$d \to X_d \in \mathbb{R}^N$$

Von $E_\theta X(t) = \underline{a}(t) \cdot \beta(\theta)$ $t \in T$ gehen wir zur Matrixschreibweise über:

$$E_\theta X(d) = A^T(d)\ \beta(\theta) = \begin{pmatrix} A_1 \\ \hdashline A_2 \end{pmatrix}^T (d)\ \beta(\theta) = (A_1^T(d) \vdots A_2^T(d))\beta(\theta)$$

$$= A_1^T(d)\ \beta_1(\theta) + A_2^T(d)\ \beta_2(\theta)$$

In dieser Darstellung ist $A_1(d)$ die Planungsmatrix zum Versuchsplan d des korrespondierenden Varianzanalyse-Modells, abhängig von der Normierung und dem Auftreten von Wechselwirkungen verschiedener Ordnung. $A_1^T(d)$ ist daher eine $p_1 \times N$ Matrix mit Komponenten aus $\{0,1\}$. Die $p_2 \times N$ Matrix $A_2^T(d)$ ist die Planungsmatrix des Regressionsanteils des Kovarianzmodells, abhängig vom verwendeten System von Regressionsfunktionen. Die Regressionsfunktionen

$$\underline{a}_2(t) = (\underline{a}_{21}(t), \ldots, \underline{a}_{2p_2}(t)) \quad t \in T$$

hängen von der Anzahl der Kovariaten K_2 und der Dimension des Wertebereichs ab

$$\underline{a}_2(\ ) = (f_1(s^{(1)}), \ldots, f_{K_2}(s^{(K_2)})) =$$

$$= (f_{11}(s^{(1)}), \ldots, f_{1g_1}(s^{(1)}), \ldots, f_{K_21}(s^{(K_2)}), \ldots f_{K_2g_{K_2}}(s^{(K_2)})$$

wobei $f_i : T \to \mathbb{R}^{g_i}$ und $p_2 = \sum_{i=1}^{K_2} g_i$. Als Beispiel nennen wir

$$f_i(s_j^{(i)}) = (id, id^2, \ldots, id^{g_i})(s_j^{(1)}) \quad i=1,\ldots,K_2, j=1,..,N(i_1,..,i_{k_1})$$

Diese Festsetzung führt auf einen polynomialen Regressionsansatz. Allgemein wird von f_i Stetigkeit und lineare Unabhängigkeit vorausgesetzt.

Beispiel:

Für $K_1 = 2$, $K_2 = 1$ betrachten wir ein Modell der Kovarianzanalyse mit (i) Standardparametrisierung und ohne Wechselwirkungen

(ii) polynomialer Regression vom Grad 2 in Δ

$$E_\theta X(t) = E_\theta X(i_1,i_2,s_j(i_1,i_2)) =$$

$$= \mu + \alpha_{i_1}(\theta) + \alpha_{i_2}(\theta) + \gamma_1(\theta) s_j(i_1,i_2) + \gamma_2(\theta) s_j^2(i_1,i_2)$$

$$i_k = 1,..,I_k, k=1,2$$

Für $d = (N_{12}, S_{12})$ finden wir die Matrixdarstellung

$$E_\theta X(d) = A_1^T(d)\ \beta_1(\theta) + A_2^T(d)\ \beta_2(\theta)$$

wobei $A_1, A_2, \beta_1, \beta_2$ wie folgt definiert sind

$$\beta_1(\theta) = (\mu, \alpha_1^{(1)}(\theta), \ldots, \alpha_{I_1}^{(1)}(\theta), \alpha_1^{(2)}(\theta), \ldots, \alpha_{I_2}^{(2)}(\theta))^T$$

$$\beta_2(\theta) = (\gamma_1(\theta), \gamma_2(\theta))^T$$

$$A_1^T(d) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 1 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \} N(1,1) \\ \} N(1,I_2) \\ \} N(2,1) \\ \} N(2,I_2) \\ \\ \} N(I_1,1) \\ \} N(I_1,I_2) \end{matrix}$$

$$A_2^T(d) = \begin{pmatrix} s_j(1,1) & s_j^2(1,1) \\ s_j(1,I_2) & s_j^2(1,I_2) \\ s_j(2,1) & s_j^2(2,1) \\ s_j(2,I_2) & s_j^2(2,I_2) \\ \vdots & \vdots \\ s_j(I_1,1) & s_j^2(I_1,1) \\ s_j(I_1,I_2) & s_j^2(I_1,I_2) \end{pmatrix} \begin{matrix} \} N(1,1) \\ \} N(1,I_2) \\ \} N(2,1) \\ \} N(2,I_2) \\ \\ \} N(I_1,1) \\ \} N(I_1,I_2) \end{matrix}$$

§ 1.2. Optimalitätskriterien und Parametrisierung

Wir interessieren uns für statistische Aussagen über Aspekte des unbekannten Parameters $\beta(\theta) = (\beta_1(\theta), \beta_2(\theta))$. Aus der Theorie der linearen Modelle folgt, daß

$$J_d := \{\varphi : \varphi = c^T A^T(d) \cdot : M^q \ni \beta \to c^T A^T(d) \cdot \beta = \varphi(\beta) \in R,\ c^T \in R^N\}$$

die Menge der schätzbaren Funktionale für das Modell

$$X(d) = A^T(d)\ \beta + Z(d)$$

ist. M^q ist ein affiner Teilraum des R^p.

Fragestellungen betreffen Aussagen über J_d bzw. Teilräume von J_d. Es ergeben sich drei Problemkreise: (1.2)

(a) Punktschätzungen für ψ aus J_d

etwa $\psi(\theta) = \beta_1(\theta)$, wobei $\beta_2(\theta)$ als Störparameter angesehen wird und umgekehrt, oder $\psi(\theta)$ = Kontraste eines Faktors.

(b) Konfidenzbereichsschätzungen für $\psi \in J_d$

(c) Tests über lineare Hypothesen wie

$H_o : \psi(\theta) = 0$ gegen $H_1 : \psi(\theta) \neq 0$ (homogener Fall)

$H_o : \psi(\theta) = \psi_o$ gegen $H_1 : \psi(\theta) \neq \psi_o$ (inhomogener Fall)

Gesucht sind "beste" Entscheidungsverfahren.

Sei $\psi(\beta) \in J_d$ schätzbarer Parameter des linearen Beobachtungsmodells

$$X(d) = A_1^T(d)\ \beta_1 + A_2^T(d)\ \beta_2 + Z(d) \quad \beta_1 \in R^{p_1},\ \beta_2 \in R^{p_2}$$

Die unter (1.2) aufgeführten Probleme haben für einen gegebenen Versuchsplan d unter Normalverteilungsannahme mit den

(1.3.)

(a) Gauß-Markov Schätzern (BLUE)

(b) F-Tests für die homogene lineare Hypothese (trennschärfster bzgl. der natürlichen Gruppe)

$G=\{g:\mathbb{R}^N \ni x \to c^T\sigma^T x+1, c\in\mathbb{R}-\{0\}, \sigma[V_h]=[V_h], \sigma[V_r]=V_r, 1\in V_r\}$

wobei $H_o : \beta \in V_h$ ⁄ $H_1 : \beta \in V_r - V_h$

F-Tests für die inhomogene lineare Hypothese (trennschärfster bzgl.

$G_t = \{f_t g_t f_t^{-1}, g\in G\}$ mit $f_t(x) = \mu(t) + x$)

wobei $H_o : \beta\in\mu_o(t)+V_h$ ⁄ $H_1 : \beta \in V_r-V_h-\mu_o(t)$

(c) Konfidenzbereichsschätzungen, äquivalent zu den Tests (genaueste equivariante Konfidenzbereichsschätzungen)

optimale Lösungen. Die Güte der angegebenen Verfahren hängt vom Versuchsplan nur über die Kovarianzmatrix des Parameters $\psi(\beta)$ ab.

Die Informationsmatrix

$$I_{\psi(\beta)}(d) := \sigma^2 \, \mathrm{Cov}^{-1} \, \hat{\psi}(\beta)$$

als Maß für die Güte der unter (1.3) angegebenen Verfahren ist insbesondere auch deshalb der Problemstellung angemessen, da bei einem nichtparametrischen Ansatz eines linearen Modelles die Kovarianzmatrix der Schätzer asymptotisch mit der Gauß-Markov Kovarianzmatrix übereinstimmt.

Das allgemeine Versuchsplanungssystem bei Modellen der Kovarianzanalyse kann nun formuliert werden.

Sei $\psi(\beta) \in J^p$ ein schätzbarer Parameter des Kovarianzmodells

$$X(d) = A_1^T(d)\ \beta_1 + Z(d) = A_1^T(d) \cdot \beta_1 + A_2^T(d) \cdot \beta_2 + Z(d)$$

und sei Φ ein positives Funktional auf

M = {M p×p Matrix, symmetrisch, positiv semidefinit}

Zu $\psi(\beta)$ ist ein Versuchsplan $d^* = (N^*_{12..K_1}; S^*_{12..K_1})$ in einer zulässigen Menge Δ von Versuchsplänen (d.h. $\forall d, d \in \Delta : J_d = J$) gesucht mit

$$\Phi(I_{\psi(\beta)}(d^*)) = \inf_{d \in \Delta} \Phi(I_{\psi(\beta)}(d))$$

In dieser Arbeit werden die Kriterien Determinantenoptimalität, $\Phi = \det^{-1}$, und gleichmäßige Optimalität, $\Phi = \Phi_a = a^T(\cdot)^{-1}a \ \forall\ a \in \mathbb{R}^p$ zur Auswahl von Versuchsplänen verwendet.

Die Parametervektoren $\beta_1(\theta)$ und $\beta_2(\theta)$ beschreiben die Effekte der Faktoren an den einzelnen Stufen des Varianzanalyse-Modells bzw. die Regressionsparameter. Sie ergeben sich als Erwartungswerte der Gauß-Markov-Schätzer $\hat{\beta}_1(\theta)$ und $\hat{\beta}_2(\theta)$, die mit dem Inversionstheorem für partitionierte Matrizen [5,165] berechnet werden.

$$\hat{\beta}(\theta) = \begin{pmatrix} \hat{\beta}_1(\theta) \\ \hline \hat{\beta}_2(\theta) \end{pmatrix} = (AA^T)^{-1}AX = \left[\left(\begin{array}{c} A_1 \\ \hline A_2 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c} A_1^T & A_2^T \end{array}\right)\right]^{-1}\left(\begin{array}{c} A_1 \\ \hline A_2 \end{array}\right)X = \begin{pmatrix} A_1A_1^T & A_1A_2^T \\ A_2A_1^T & A_2A_2^T \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} A_1X \\ A_2X \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} (A_1Q(A_2)A_1^T)^{-1}A_1Q(A_2)X \\ (A_2P(A_1)A_2^T)^{-1}A_2P(A_2)X \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{mit } Q(A_2)=E-A_2^T(A_2A_2^T)^{-1}A_2 \\ \text{mit } P(A_1)=E-A_1^T(A_1A_1^T)^{-1}A_1 \end{array}$$

Falls A singulär ist, so kann das entsprechende Inversionstheorem für verallgemeinerte Inverse von [14] verwandt werden.

Für den Gesamtparameter β erhalten wir die Informationsmatrix

$$I_\beta(d)=\sigma^{-2}\mathrm{Cov}^{-1}\hat{\beta}(X(d))=\sigma^{-2}\begin{pmatrix} \mathrm{Cov}[\hat{\beta}_1(X(d))] & \mathrm{Cov}[\hat{\beta}_1\hat{\beta}_2](X(d)) \\ \mathrm{Cov}[\hat{\beta}_2\hat{\beta}_1](X(d)) & \mathrm{Cov}[\hat{\beta}_2(X(d))] \end{pmatrix}^{-1}$$

$$\Rightarrow I_{\beta_1}(d) = A_1(d)A_1^T(d)-A_1A_2^T(A_2A_2^T)^{-1}A_2A_1^T$$

$$\Rightarrow I_{\beta_2}(d) = A_2(d)A_2^T(d)-A_2A_1^T(A_1A_1^T)^{-1}A_1A_2^T$$

die sich ebenfalls nach [5,165] und für verallgemeinerte Inverse nach [14] ergeben.

Beispiel:

Sei $K_1=2$, $K_2=1$ und $d \in \bar{\Delta}$ mit $\underline{a}_2=id$

$$A_1A_1^T(d) = \begin{pmatrix} N_1(1) & \cdots & 0 & N(1,1) & \cdots & N(1,I_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & N_1(I_1-1) & N(I_1-1,1) & \cdots & N(I_1-1,I_2) \\ N(1,1) & \cdots & N(I_1-1,1) & N_2(1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ N(1,I_2) & \cdots & N(I_1-1,I_2) & 0 & \cdots & N_2(I_2) \end{pmatrix}$$

$$A_2(d)=(s(1,1)1^T_{N(1,1)},\ldots,s(1,I_2)1^T_{N(1,I_2)},\ldots,s(I_1,I_2)1^T_{N(I_1,I_2)})$$

Wir führen Hilfsvariable R_{ki_k} ein $(k=1,2, i_k=1,\ldots,I_k)$:

$$R_{1i_1} = R_{1i_1}(d) = \sum_{j=1}^{I_2} N(i_1,j)s(i_1,j) \qquad i_1=1,\ldots,I_1$$

$$R_{2i_2} = R_{2i_2}(d) = \sum_{j=1}^{I_1} N(j,i_2)s(j,i_2) \qquad i_2=1,\ldots,I_2$$

Damit können wir die Produktmatrix $A_1(d)A_2^T(d)$ vereinfacht ausdrücken und erhalten die Informationsmatrizen für β_1 bei Kontrollparametrisierung und β_2 in der Darstellung:

$$A_1(d)A_2^T(d) = (R_1,R_2)(d) := (R_{11},\ldots,R_{1I_1-1},R_{21},\ldots,R_{2I_2})(d)$$

$$I_{\beta_1}(d) = A_1(d)A_1^T(d) - \left(\sum_{i_1=1}^{I_1}\sum_{i_2=1}^{I_2} N(i_1,i_2)s^2(i_1,i_2)\right)^{-1}\begin{pmatrix}((R_{1i}R_{1j})_i^j)((R_{1i}R_{2j})_i^j)\\((R_{2i}R_{1j})_i^j)((R_{2i}R_{2j})_i^j)\end{pmatrix}$$

$$I_{\beta_2}(d) = \sum_{i_1=1}^{I_1}\sum_{i_2=1}^{I_2} N(i_1,i_2)s^2(i_1,i_2) - (R_1,R_2)(A_1(d)A_2^T(d))^{-1}\begin{pmatrix}R_1^T\\R_2^T\end{pmatrix}$$

Ausgehend von der Standardparametrisierung betrachten wir in dieser Arbeit Modelle der Kovarianzanalyse, ohne Wechselwirkungseffekte, der Form:

$$(1.4)\quad E_\theta X_j(i_1,\ldots,i_{K_1}) = \mu(\theta) + \sum_{k=1}^{K_1} \alpha_{i_k}^{(k)}(\theta) + \sum_{i=1}^{K_2}\sum_{k=1}^{g(i)} \gamma_{ik}(\theta) f_{ik}(s_j^{(i)}(i_1,\ldots,i_{K_1}))$$

$$i_k=1,\ldots,I_k,\ k=1,\ldots,K_1$$

$$j=0,1,\ldots,N(i_1,\ldots,i_{K_1})$$

$$s_j^{(l)}(i_1,\ldots,i_{K_1})\in[a_l,b_l],\ l=1,\ldots,K_2$$

Mit der Identifikationsbedingung

$$\sum_{i_k=1}^{I_k} \alpha_{i_k}^{(k)} = 0 \quad k=1,\ldots,K_1$$

wird der $\sum_{k=1}^{K_1} I_k - K_1 + 1 + \sum_{k=1}^{K_2} g(k)$ - dimensionale Raum Ψ aller schätzbaren Funktionale der Modellvorstellung (1.4) festgelegt.

In dieser Darstellung läßt sich

$$\beta(\theta)=(\mu,\alpha_1^{(1)},\ldots,\alpha_{I_1}^{(1)},\ldots,\alpha_1^{(K_1)},\ldots,\alpha_{I_{K_1}}^{(K_1)},\gamma_{11},\ldots,\gamma_{1g(1)},\ldots,\gamma_{K_2g(K_2}$$

als der unbekannte Parametervektor des Modells (1.4.) auffassen. Um die Bestimmung der Informationsmatrix für einen oder mehrere Parametervektoren $(\alpha_1^{(k)},\ldots,\alpha_{I_k}^{(k)})^T$ zu erleichtern, wird das Modell (1.4.) geeignet transformiert, indem der schätzbare Raum mit einer speziellen Basis $\varphi(\beta)$ versehen wird. Außerdem wird $C = \prod_{i=1}^{K_2}[a_i,b_i]$ so transformiert, daß die Kovariaten Werte im Intervall $[-1,+1]$ annehmen.

$\varphi(\beta)$ =

$$(a_1^{(1)},\ldots,a_{I_1-1}^{(1)},a_1^{(2)},\ldots,a_{I_2}^{(2)},\ldots,a_1^{(K_1)},\ldots,a_{I_{K_1}}^{(K_1)},\gamma_{11},\ldots,\gamma_{K_2g(K_2)})^T$$

wobei

$$a_{i_k}^{(k)}=\alpha_{i_k}^{(k)}-\alpha_{I_k}^{(k)} \quad k=1,\ldots,K_1-1,\ i_k=1,\ldots,I_k$$

$$a_{i_{K_1}}^{(K_1)}=\alpha_{i_{K_1}}^{(K_1)}+\mu+\sum_{k=1}^{K_1-1}\alpha_{I_k}^{(k)} \qquad i_{K_1}=1,\ldots,I_{K_1}$$

Damit ist das zu (1.4.) äquivalente Modell mit der Kontrollparametrisierung darstellbar als

(1.5.)

$$E\,X_j(i_1,\ldots,i_{K_1}) =$$

$$\sum_{k=1}^{K_1} a_{i_k}^{(k)} + \sum_{i=1}^{K_2}\sum_{k=1}^{g(i)} \gamma_{ik} f_{ik}(s_j^{(i)}(i_1,\ldots,i_{K_1}))$$

$$i_k=1,\ldots,I_k,k=1,\ldots,K_1,j=0,1,\ldots,N(i_1,\ldots,i_{K_1})$$

$$s_j^{(i)}(i_1,\ldots,i_{K_1})\in[-1,+1],\ i=1,\ldots,K_2$$

mit der Identifikationsbedingung

$$a_{I_k}^{(k)}(0) = 0 \quad k=1,\ldots,K_1-1$$

Da das Kriterium der D- und G-Optimalität invariant gegenüber linearer Transformation ist, und jede andere Parametrisierung durch lineare Transformation aus der Kontrollparametrisierung hervorgeht, ist diese keine Einschränkung. Die Effekte von Wechselwirkungen in einer Gruppe von $L(0<L\leq K_1)$ Faktoren bis zur Ordnung p $(p=p(i),i=1,\ldots,L)$ beim varianzanalytischen Anteil des Kovarianzmodells können durch Übergang zu einem Kovarianzmodell mit L-fach klassifiziertem Beobachtungsmodell der Varianzanalyse behandelt werden.

Um die Punktschätzungen im Varianzanalyse-Modell mit denen im Kovarianzmodell vergleichen zu können, ist es sinnvoll, im Regressionsanteil eine Normierung vorzunehmen:

$$\sum_{i=1}^{K_2} \sum_{k=1}^{g(i)} (\gamma_{ik}(f_{ik}(s_j^{(i)}(i_1,\ldots,i_{K_1})) - \frac{1}{N(i_1,\ldots,i_{K_1})} \sum_{j=1}^{N(i_1,\ldots,i_{K_1})} f_{ik}(s_j^{(i)}(i_1,\ldots,i_{K_1}))))$$

Dabei wird auch μ geändert und zwar entspricht das hier auftretende μ dem, das im korrespondierenden Varianzanalyse-Modell auftritt.

Kovarianzmodelle mit einem einfach-klassifizierten varianzanalytischen Modellanteil werden durch

$$(1.6.) \quad \beta_1(\theta) = (\mu + \alpha(1),\ldots,\mu+\alpha(I))^T$$

parametrisiert.

Wir werden für die Untersuchung der Versuchsplanungsprobleme voraussetzen,

1) $f_{ik} = id_{S_{12\ldots K_1}}$ $\quad i=1,\ldots,K_2,\ k=1,\ldots,g(i)$

2) $g(i) = 1$ $\quad i=1,\ldots,K_2$

3) Wie bereits durch das beschriebene Modell angedeutet, wird der Regressionsparameter als unabhängig von den qualitativen Faktoren angesehen.

§ 2. Charakterisierung optimaler Versuchspläne für den Regressionsparameter in Kovarianzmodellen

§ 2.1. Das Problem der Versuchsplanung für den Regressionsparameter β_2

Bei der Untersuchung von Beobachtungsmodellen der Kovarianzanalyse ist häufig die Größe der Abhängigkeit der Beobachtungen $X(t_i)$ von der Kovariaten t_{2i}, (i=1,...,I) von Bedeutung. In diesen Fällen wird β_1 als Störparameter angesehen. Der Parameter β_2 bezeichnet dann etwa die Regression des Mastendgewichts bzgl. des Anfangsgewichts oder die Regression der Färbwirkung chemischer Stoffe in Abhängigkeit vom Grad der Verunreinigung der Grundsubstanz.

Die Informationsmatrix für β_2 ist nach § 1. gegeben durch

$$I_{\beta_2}(\mathfrak{d}) = I_{\beta_2}(N_{12..K_1}, S_{12..K_1}) =$$

$$= I_{\beta_2}(N_{12..K_1}, (S^{(l)}_{12..K_1},\ l=1,...,K_2))$$

$$= A_2(d)A_2^T(d) - A_2(d)A_1^T(d)\,(A_1(d)A_1^T(d))^{-1}A_1(d)A_2^T(d)$$

Die Auswahl von Versuchsplänen wird mit dem Determinantenkriterium und im Falle von $K_2=1$ mit dem Kriterium G-Optimalität durchgeführt. Wegen

$$\Phi(I_{\beta_2}(d)) \leq \Phi(A_2(d)A_2^T(d))$$

wird unser Ziel sein, den ersten Term von $I_{\beta_2}(d)$ zu maximieren, während der zweite Term minimal gehalten wird. Eine getrennte Optimierung ist nicht möglich, da die Ma-

trix $A_1(d)A_2^T(d)$ bei der Optimierung von $A_2(d)A_2^T(d)$ mit vorgegebener Matrix $N_{12..K_1}$ bereits wesentlich festgelegt ist.

Die Abhängigkeit von N_{12} tritt bei Versuchsplänen in Δ bei $A_1A_2^T$ als Summationsgrenze auf, daher ist die Methode der Lagrangemultiplikatoren hier nicht anwendbar, im Gegensatz zur Versuchsplanung in $\bar{\Delta}$. Daher werden wir mit der Forderung der Ganzzahligkeit von N_{12} in die Lage versetzt, kombinatorische Methoden anzuwenden.

Für die Angabe von $S_{12..K_1}$ verwenden wir als Abkürzung

$[x] = \max\{ n \in \mathbb{N} : n \leq x \}$

§ 2.2. Darstellung der Informationsmatrizen für β_2 zu den Kovarianzmodellen mit $K_1 = 1,2$

Für Kovarianzmodelle mit eindimensionaler linearer Regression verwenden wir die in § 1.2. angegebene Parametrisierung: (2.1)

$$E\, X_j(i) = \alpha(i) + \sum_{k=1}^{K_2} \gamma_k\, s_j^{(k)}(i) \qquad i=1,\ldots,I$$

Die Informationsmatrix ist eine $K_2 \times K_2$ Matrix

$$I_{\beta_2}(d) =$$

$$I_{\beta_2}(N_1,(S_1^{(k)},\ k=1,..,K_2) = A_2(d)A_2^T(d) - A_2A_1^T(A_1A_1^T)^{-1}A_1A_2^T(d) =$$

$$\left(\left(\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{N(i)} s_j^{(k)}(i)s_j^{(l)}(i) - \frac{1}{N(i)}\sum_{j=1}^{N(i)} s_j^{(k)}(i)\right)\left(\frac{1}{N(i)}\sum_{j=1}^{N(i)} s_j^{(l)}(i)\right)\right)_{k,l=1,..,K_2}$$

die sich wegen der Diagonalgestalt von $(A_1(d)A_1(d))^{-1}$ sehr leicht berechnen läßt. Wir erkennen sofort, daß es keine Versuchspläne in $\bar{\Delta}$ zum Parameter $K_1 = 1$ mit nichttrivialen Optimalitätseigenschaften gibt, da $I_{\beta_2}(d) = 0$-Matrix für alle $d \in \bar{\Delta}$. Das liegt daran, daß sich das Kovarianzmodell als reines varianzanalytisches Modell auffassen läßt, und daher ist der Vektor γ nicht schätzbar.

Im Falle von $K_1=2$ verwenden wir Kovarianzmodelle mit Kontrollparametrisierung.

(2.2)

$$I_{\beta_2}(d) = I_{\beta_2}(N_{12}, S_{12}^{(k)},\ k=1,2,\ldots,K_2) =$$

$$= \Big(\sum_{i_1=1}^{I_1} \sum_{i_2=1}^{I_2} \sum_{j=1}^{N(i_1,i_2)} s_j^{(k)}(i_1,i_2)\, s_j^{(l)}(i_1,i_2) \Big)_{k,l=1,\ldots,K_2}$$

$$- \Big(\Big(\sum_{i_2=1}^{I_2} \sum_{j=1}^{N(i_1,i_2)} s_j^{(k)}(i_1,i_2) \Big)_{k}^{i_1}, \Big(\sum_{i_1=1}^{I_1} \sum_{j} s_j^{(k)}(i_1,i_2) \Big)_{k}^{i_2} \Big) \cdot$$

$$\cdot \left(A_1(N_{12})A_1^T(N_{12})\right)^{-1} \Big(\Big(\sum_{i_2}^{I_2} \sum_{j} s_j(i_1,i_2) \Big), \Big(\sum_{i_1}^{I_1} \sum_{j} s_j(i_1,i_2) \Big) \Big)^T$$

Diese Informationsmatrix werden wir durch Einführung von Hilfsvariablen, die später eine wichtige Rolle spielen, anders darstellen:

Sei $R_1(d) = R_1(N_{12}, S_{12}) =$

$$= \Big(\Big(\sum_{i_2=1}^{I_2} \sum_{j=1}^{N(i_1,i_2)} s_j^{(k)}(i_1,i_2) \Big)_{k=1,\ldots,K_2}^{i_1=1,\ldots,I_1-1} \Big)$$

$R_2(d) = R_2(N_{12}, S_{12}) =$

$$= \Big(\Big(\sum_{i_1=1}^{I_1} \sum_{j=1}^{N(i_1,i_2)} s_j^{(k)}(i_1,i_2) \Big)_{k=1,\ldots,K_2}^{i_2=1,\ldots,I_2} \Big)$$

(2.3)

$$I_{\beta_2}(d) = I_{\beta_2}(N_{12}, (S_{12}, k=1,\ldots,K_1)) =$$

$$= A_2(d)A_2(d) - (R_1(d), R_2(d))\left(A_1(d)A_1(d)\right)^{-1}(R_1(d), R_2(d))^T$$

§ 2.3. Optimale Versuchspläne für den Regressionsparameter in $\Delta(N_1,N_2,[-1,+1]^k)$ und $\Delta(N,[-1,+1]^k)(k=1,2)$.

Mit Hilfe der in § 2.2. explizit angegebenen Informationsmatrizen für den Regressionsparameter werden jetzt G_{β_1}- bzw. D_{β_1}-optimale Versuchspläne in Δ charakterisiert. Aus der speziellen Form der Matrix läßt sich eine Reduktion des Variationsbereichs der Kovariaten ableiten.

Lemma 2.3.1.: In Modellen der Kovarianzanalyse mit $K_2=1$ und linearer Regression gilt für die Informationsmatrix des Regressionsparameters:

$$\forall\, N_{12..K_1}: \max_{S_{1..K_1}\in[-1,+1]^N} I_{\beta_2}(N_{1..K_1},S_{1..K_1}) = \max_{S_{1..K_1}\in\{-1+1\}^N} I_{\beta_2}(N_{1..K_1},S_{1..K_1})$$

Beweis:

Die Matrix $E - A_1^T(A_1A_1^T)^{-1}A_1$ ist idempotent, also ist

$$I_{\beta_2}(N_{1..K_1},S_{1..K_1}) = I_{\beta_2}(d) = (A_2(E-A_1^T(A_1A_1^T)^{-1}A_1)A_2^T)(d)$$

positiv semidefinite symmetrische quadratische Form in den Variablen

$$s_j(i_1,i_2,\ldots,i_{K_1}) \qquad i_k=1,\ldots,I_k,k=1,\ldots,K_1,j=1,\ldots,N(i_1,..i$$

Die $1\times N$ Matrix $S_{12..K_1}$ ist nach § 1. die lexikographische Anordnung der $s_j(\ldots)$. Dann ist

$Q(S_{12..K_1}) := I_{\beta_2}(N_{1..K_1},S_{1..K_1})$ eine konvexe Funktion

in $S_{12..K_1}$, und da der Definitionsbereich von $S_{12..K_1}$ konvex ist, kann die Optimierung von Q auf den Eckpunkten von $[-1,+1]^N$ durchgeführt werden.

Satz 2.3.2.:

(a) G_{β_2}-optimale Versuchspläne in $\Delta(N_1,[-1,+1])$ mit linearer Regression sind charakterisiert durch:

$d = (N_1, S_1^*)$ mit

$$S_1^* \ni s_j^*(i) = \begin{cases} +1 & j=1,\ldots,[N_1(i)/2] \\ -1 & j=[N_1(i)/2]+1,\ldots,N_1(i) \end{cases}$$

$i=1,\ldots,I$

(b) In $\Delta(N,[-1,+1])$ sind G_{β_2}-optimale Versuchspläne bei linearer Regression charakterisiert durch:

(i) $N_1^*(i) = 2 \quad i=1,\ldots,I-1$

$N_1^*(I) = N - 2(I-1)$

(ii) S_1^* in Abhängigkeit von N_1^* wie unter (a)

D_{β_2}-optimale Versuchspläne in Kovarianzmodellen mit unabhängiger linearer Regression $d^*=(N_1, S_1^{*(1)}, S_1^{*(2)})$ in

(c) $\Delta(N_1,[-1,+1]^2)$ sind gegeben durch

(i) $S_1^{*(1)} \ni s_j^{*(1)}(i) = \begin{cases} +1 & j=1,\ldots,[(N(i)+1)/2] \\ -1 & j=[(N(i)+1/2]+1,\ldots,N(i) \end{cases}$

$i=1,\ldots,I$

(ii) $S^{*(2)} \ni s_j^{*(2)}(i) = \begin{cases} +1 & j=[N(i)/4] \vee [3N(i)/4] < j \leq N(i) \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$

$i=1,\ldots,I$

(d) $\Delta(N,[-1,+1]^2)$ sind gegeben durch

(i) $N_1^*(i) = 4[N/4(I-1)]$ $\quad i=1,\ldots,I-1$

$$N_1^*(I) = N - \sum_{i=1}^{I-1} N_1(i)$$

(ii) $S_1^{*(l)}$, $l=1,2$ in Abhängigkeit von N_1^* wie unter (c)

Beweis:

(a) Sei $K_2=1$. Wir verwenden die Form der Informationsmatrix § 2.2. (2.2) mit $K_2 = 1$.
Nach Lemma 2.3.1. gilt $s_j^{(1)}(i)=s_j^{(2)}(i) \in \{+1,-1\}$, also stellt sich das Optimierungsproblem so dar:

$$I_{\beta_2}(d^*) = I_{\beta_2}(N_1,S_1^*) = \max_{S_1} I_{\beta_2}(N_1,S_1) =$$

$$= N - \min_{S_1} \sum_{i=1}^{I} 1/N_1(i) \sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j(i))^2 =$$

$$= N - \sum_{i=1}^{I} 1/N_1(i) \min_{S_1} \left(\sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j(i))^2 \right. =$$

$$= N - \sum_{i=1}^{I} 1/N_1(i) \; 1_{\{j:N_1(j)\neq 0 \bmod 2\}}(N_1(i))$$

Die Aufteilung der N(i) Kovariaten auf die Punkte +1,-1 ist mit folgender Vorschrift durchgeführt worden:

$$s_j^*(i) = \begin{cases} +1 & j=1,\ldots,[N_1(i)/2] \\ -1 & j=[N_1(i)/2]+1,\ldots,N(i) \end{cases}$$

(b) Für $d \in \Delta(N,[-1,+1])$ ergibt sich aus dem vorangegangenen

$$I_{\beta_2}(d^*) = I_{\beta_2}(N_1^*, S_1^*) = \max_{\substack{N_1 \in \Delta(N) \\ S_1 \in \{-1,+1\}^N}} I_{\beta_2}(N_1, S_1) =$$

$$= N - \min_{N_1, S_1} \sum_{i=1}^{I} 1/N_1(i) \left(\sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j(i) \right)^2 =$$

$$= N - \min_{N_1} \sum_{i=1}^{I} 1/N_1(i) \; 1_{\{j : N_1(j) \neq 0 \bmod 2\}}(N_1(i)) =$$

$$= \begin{cases} N \text{ falls } N \equiv 0 \bmod 2 \\ N-1/(N-2(i-1)) \text{ falls } N \not\equiv 0 \bmod 2 \end{cases}$$

Wir können $N_1(i)$ beliebig gradzahlig definieren, da der Wert von $I_{\beta_1}(d)$ nur für nichtgradzahlige $N_1(i)$ verringert wird. Falls $N \not\equiv 0 \bmod 2$, minimieren wir $1/N_1(I)$, indem wir diesem einzigen nichtgradzahligen Wert $(N_1(i)=2, i=1,..,I-1)N_1(I)$ maximieren. S_1^* wird in Abhängigkeit von N_1^* wie in (a) definiert.

(c) Sei $K_1=1$, $K_2=2$. Wir wenden das Determinantenkriterium auf § 2.2. (2.2) an. Aus Teil (a), (b) des Beweises wissen wir, wie die Hauptdiagonale der Informationsmatrix maximiert wird, daraus ergibt sich die Optimierung wie folgt:

$$\det I_{\beta_2}(d^*) = \det I_{\beta_2}(N_1^*, S_1^{*(1)} S_1^{*(2)}) =$$

$$= \max_{\substack{N_1 \in \Delta(N_1) \\ S_1 \in \{-1,+1\}}} \det I_{\beta_2}(N_1, S_1^{*(1)}, S_1^{(2)})$$

$$= \max \{ (\sum_{ij} s_j^{(1)2}(i) - \bar{s}^{(1)2}(i)) (\sum_{ij} s_j^{(2)2}(i) - \bar{s}^{(2)2}(i))$$

$$-(\sum\sum(s_j^{(1)}(i)s_j^{(2)}(i)-\bar{s}^{(1)}(i)\bar{s}^{(2)}))^2\}$$

mit $\bar{s}^{(l)}(i) := 1/N_1(i) \sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j^{(l)}(i)$ $\quad i=1,\ldots,I,\ l=1,2$

Wir bestimmen $S_1^{(1)}$ so, daß $\sum\sum(s_j^{(1)2}(i)-\bar{s}^{(1)2}(i))$ für alle N_1 maximal wird.

$$S_1^{*(1)} \ni s_j^{*(1)}(i) = \begin{cases} +1 & j=1,\ldots,[(N_1(i)+1)/2] \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

$i=1,\ldots,I$

Die $1\times N$ Matrix $S_1^{(2)}$ wird so bestimmt, daß, als Vektoren auf gefaßt, $S_1^{(1)}$ und $S_1^{(2)}$ ein minimales (vom Betrag) Skalarprodukt besitzen:

$$\sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j^{(1)}(i)s_j^{(2)}(i) \quad \text{minimal} \qquad i=1,\ldots,I$$

Diese Forderung wird von

$$S_1^{*(2)} \ni s_j^{*(2)}(i) = \begin{cases} +1 & j\leq[N_1(i)/4],j>N_1(i)\,3/4 \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

$i=1,\ldots,I$

erfüllt. Damit ist erreicht:

(i) $\sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j^{(k)}(i) \in \{-1,0,+1\}$ $\qquad i=1,\ldots,I$

(ii) $\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j^{(1)}(i)s_j^{(2)}(i) \in \{-2,0\}$

(iii) $\sum_{j=1}^{N_1(i)} (s_j^{(1)}(i)s_j^{(2)}(i)-\bar{s}^{(1)}\bar{s}^{(2)}(i))=0$ für $i: N_1(i)\equiv 0 \bmod 4$, $N_1(i)\equiv 1 \bmod 4$

$=-2$ für $i: N_1(i)=2 \bmod 4$, $N_1(i)=3 \bmod 4$

(d) Nach Teil (c) stellt sich für gegebene Beobachtungsgrößen N_1 die Informationsmatrix mit $S_1^{*(i)}$, i=1,2 so dar:

$$\det I_{\beta_2}(N_1, S_1^{*(1)}, S_1^{*(2)}) = N - 4 \sum_{i=1}^{I} 1_{\{j:N_1(j)=2 \bmod 4\}}(N_1(i)) - 4 \sum_{i=1}^{I} 1_{\{j:N_1(j)\equiv 3 \bmod 4\}}(N_1(i))$$

$$\det I_{\beta_2}(N_1, S_1^{*(2)}) =$$

$$= N - \min_{N \in \Delta(N)} 4\{ \sum_{i=1}^{I} 1_{\{N_1(j)\equiv 2 \bmod 4\} \cup \{N_1(j)\equiv 3 \bmod 4\}}(N_1(i))$$

Wir zerlegen N in I Summanden mit

$$N_1(i) = 4[N/(4(i-1))] \qquad i=1,\ldots,I-1$$

$$N_1(I) = N - \sum_{i=1}^{I} N_1(i)$$

und erreichen

$$\det I_{\beta_2}(d^*) = \begin{cases} N & \text{falls } N/I \equiv 0 \bmod 4 \\ \leq N-4 & \text{sonst} \end{cases}$$

Notation: $\mathbb{N}_I := \{i \in \mathbb{N}: i \leq I\}$ $\quad I \in \mathbb{N}$

Satz 2.3.3.:

(a) G_{β_2}-optimale Versuchspläne $d^* = (N^*_{12}, S^*_{12})$ sind in $\Delta(N_1, N_2, [-1,+1])$ mit linearer Regression charakterisiert durch

(i) $N^*(i_1,i_2) = N_1(i_1)N_2(i_2)/N \quad i_k=1,\ldots,I_k, k=1,2$

(ii) Für $(i_1,i_2) \in C_1 \times D_1 \cup C_1^c \times D_1^c$ (c bzgl. C,D)

$$s_j^*(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & j=1,\ldots,[(N(i_1,i_2)+1)/2] \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

Für $(i_1,i_2) \in (C_1 \times D_1 \cup C_1^c \times D_1^c)^c$ (c bzgl. $\mathbb{N}_{I_1}, \mathbb{N}_{I_2}$)

$$s_j^*(i_1,i_2) = \begin{cases} -1 & j=1,\ldots,[(N(i_1,i_2)+1)/2] \\ +1 & \text{sonst} \end{cases} \quad k=1,2$$

wobei $N=a_1a_2, N_k(i_k)=a_kc_k(i_k)$, $i=1,\ldots,I_k$,

$C = \{i: c_1(i) \equiv 1 \bmod 2\} = C_1 \dot\cup C_2 \quad \#C_1 = [\#C/2]$

$D = \{i: c_2(i) \equiv 1 \bmod 2\} = D_1 \dot\cup D_2 \quad \#D_1 = [\#D/2]$

(b) G_{β_2}-optimale Versuchspläne $d^*=(N^*_{12}, S^*_{12})$ sind in $\Delta(N,[-1,+1])$ mit linearer Regression charakterisiert durch prop. Versuchspläne mit

(i) $N_1^*(i_1) = 2a_1 \quad i_1=1,\ldots,I_1-1$

$N_1(I_1) = N-2(I_1-1)a_1$

$N_2^*(i_2) = 2a_2 \quad i_2=1,\ldots,I_2-1$

$N_2^*(I_2) = N-2(I_2-1)a_2$

(ii) $S^*_{12}=S^*_{12}(N_1^*)$ wie unter Teil (a)

(c) Asymptotisch D_{β_2}-optimale Versuchspläne in $\Delta(N_1,N_2,[-1,+1]^2)$ sind gegeben durch $d^*=(N^*_{12}, S^{*(1)}_{12}, S^{*(2)}_{12})$ mit

(i) $N^*(i_1,i_2)=N_1(i_1)N_2(i_2)/N \qquad i_k=1,\dots,I_k,k=1,2$

(ii) Sei $I_k'\cup I_k''=\tilde{I}_k\cup\tilde{\tilde{I}}_k=\{i_k:c_k(i_k)\equiv 1 \bmod 2\} = \{i_1,\dots,i_{L_k}\}$

$I_k' = \{i_1,\dots,i_{l_k}\}$ mit $l_k = [L_k/2]$

$\tilde{I}_k = \{i_1,\dots,i_{r_k}\} \cup \{i_{l+1},\dots,i_{s_r}\}$ mit $r_k=[l_k/2], s_k=[(L_k-l_k)/2]$

$J_k'\cup J_k'' = \{j_k:c_k(j_k) = 0 \bmod 2\}$

$\#I_k' - \#I_k''$, $\#\tilde{I}_k - \#\tilde{\tilde{I}}_k$, $\#J_k' - \#J_k'' \in \{0,1\}$

$k=1,2$

wobei wegen der Ganzzahligkeit der betrachteten Versuchspläne gilt

$N=a_1a_2, N_k(i_k)=a_kc_k(i_k) \qquad i_k=1,\dots,I_k,k=1,2$

$$S_{12}^{*(1)}\ni s_j^{*(1)}(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & j=1,\dots,[(N(i_1,i_2)+1)/2] \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$(i_1,i_2)\in I_1'\times I_2'\cup I_1''\times I_2''$$

$$s_j^{*(1)}(i_1,i_2) = \begin{cases} -1 & j=1,\dots,[(N(i_1,i_2)+1)/2] \\ +1 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$(i_1,i_2)\in N_{I_1}\times N_{I_2} - I_1'\times I_2' - I_1''\times I_2''$$

$$S_{12}^{*(2)}\ni s_j^{*(2)}(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & j=1,\dots,\left[\dfrac{[\frac{N(i_1,i_2)+1}{2}]+1}{2}\right] \quad j>[1+\frac{3}{4}N(i_1,i_2)] \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$(i_1,i_2)\in(J_1'\cup\tilde{I}_1)\times(J_2'\cup\tilde{I}_2) =: J_o$$

$$s^{*(2)}(i_1,i_2) = \begin{cases} -1 & j=1,\dots,\left[\dfrac{[\frac{N(i_1,i_2)+1}{2}]+1}{2}\right], j>[1+\frac{3}{4}N(i_1,i_2)] \\ +1 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$(i_1,i_2)\in N_{I_1}\times N_{I_2} - J_o$$

(d) Asymptotisch D_{β_2}-optimale Versuchspläne in $\Delta(N,[-1,+1]^2)$ mit linear unabhängiger Regression sind gegeben durch

$d^* = (N_{12}^*, S_{12}^{*1}, S_{12}^{*2})$ mit

(i) $N^*(i_1,i_2) = N_1^*(i_1)N_2^*(i_2)/N \quad i_k=1,\ldots,I_k,\ k=1,2$

$N_1^*(i_1) = 2a_1 \qquad i_1=1,\ldots,I_1-1$

$N_1^*(I_1) = N-2a_1(I_1-1)$

$N_2^*(i_2) = 2a_2 \qquad i_2=1,\ldots,I_2-1$

$N_2^*(I_2) = N-2a_2(I_2-1)$

(ii) $S_{12}^{*(k)} = S_{12}^{(k)}(N_1^*,N_2^*)$ wie in Teil (c)

Beweis:

(a) Sei $K_1=2, K_2=1$. Wir verwenden die Form der Informationsmatrix aus § 2.2. (2.3.). Mit Lemma 2.3.1. gilt wegen

$$s_j(i_1,i_2) = s_j^{(1)}(i_1,i_2) \in \{-1,+1\}$$

$$I_{\beta_2}(d^*)=I_{\beta_2}(N_{12}^*,S_{12}^*) = \max_{\substack{N_{12}\in\Delta(N_1,N_2)\\ s_j(i_1,i_2)\in\{-1,+1\}}} I_{\beta_2}(N_{12},S_{12}) =$$

$$=N-\min_{\substack{N_{12}\in\Delta(N_1,N_2)\\ S_{12}\in\{-1,+1\}^N}} (R_1(d),R_2(d))(A_1A_1^T)^{-1}((R_1(d),R_2(d))^T$$

Wir wissen, daß proportionale Versuchspläne in $\Delta(N_1,N_2)$ G_{β_2}-optimal sind (Kurotschka [9]):

d.h.

$$\forall\ a\in R^p : a^T(A_1(N_{12})A_1(N_{12}))^{-1}a \geq a^T(A_1(N_{12}^*)A_1(N_{12}^*))^{-1}a$$

wobei $N_{12}^* := \{N^*(i_1,i_2)=N_1(i_1)N_2(i_2)/N \quad i_k=1,..,I_k,k=1,2\}$

Insbesondere gilt dann

$$I_{\beta_2}(N_{12}^*,S_{12}^*) = N -$$

$$\min_{S_{12}\in\{-1,+1\}} (R_1(N_{12}^*,S_{12}),R_2(N_{12}^*,S_{12}))(A_1(N_{12}^*)A_1^T(N_{12}^*))^{-1}(R_1(d)^*,R_2$$

Es bleibt die Minimierung über S_{12}, die komponentenweise durchgeführt wird, bei $R = (R_1 R_2)$:

$$s_j(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & j=1,\ldots,[(N(i_1,i_2)+1)/2] \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

$(i_1,i_2) \in C_1 \times D_1 \cup C_2 \times D_2 := C_o$

$$s_j(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & j=[(N(i_1,i_2)+1)/2]+1,\ldots,N(i_1,i_2) \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

$(i_1,i_2) \in N_{I_1} \times N_{I_2} - C_o$

Dabei sind C_i und D_i (i=1,2) wie folgt definiert:

$C_1 \cup C_2 := \{i : c_1(i) \equiv 1 \bmod 2\}$ $\quad \#C_1 - \#C_2 = \min$

$D_1 \cup D_2 := \{i : c_2(i) \equiv 1 \bmod 2\}$ $\quad \#D_1 - \#D_2 = \min$

Vorausgesetzt ist die aus Ganzzahligkeitsgründen existierende Zerlegung von N, N_1 und N_2 derart, daß gilt:

$N = a_1 a_2$, $N_k(i_k) = a_k c_k(i_k)$ $\quad i_k = 1,\ldots,I_k$, $k=1,2$

Mit dieser Festlegung von S_{12} erhalten wir für proportionale Versuchspläne einen Vektor $R(d) = A_2(d) A_1^T(d)$ mit den Komponenten gleich O, falls $\#C_1 = \#C_2$ und $\#D_1 = \#D_2$ gilt. Falls $\#C_1 = \#C_2$ und $\#D_1 > \#D_2$, so ist $R_1(d) = O$, im umgekehrten Fall $R_2(d) = O$; dabei wurde $I_1 \notin C_1 \cup C_2$ vorausgesetzt. Falls die Mächtigkeiten von C_i bzw. D_i nicht übereinstimmen, sind die Komponenten $(R_1(d)(i), i \in C_1 \cup C_2)$ und $(R_2(d)(i), i \in D_1 \cup D_2)$ verschieden von Null.

Damit läßt sich die Informationsmatrix von β_2 explizit angeben:

Die Inverse von $A_1(N_{12}^*) A_1^T(N_{12}^*)$ ist

$$\begin{pmatrix} ((\delta_{ij}/N_1(i)+1/N_1(I_1))_{1\le i,j\le I_1-1}) & ((-1/N_1(I_1))_{\substack{1\le j\le I_2\\ 1\le i\le I_1-1}}) \\ ((-1/N_1(I_1))_{\substack{1\le i\le I_1-1\\ 1\le j\le I_2}}) & ((\delta_{ij}/N_2(i) + \frac{N-N_1(I_1)}{N\cdot N_1(I_1)})_{1\le i,\ j\le I_2}) \end{pmatrix}$$

und damit

$$I_{\beta_2}(N_{12},S_{12}) = N - \sum_{i\in C} 1/N_1(i) - \sum_{j\in D} 1/N_2(j)$$

(b) Die Optimierung in $\Delta(N,[-1,+1])$ erfolgt durch die Minimierung von #C und #D, indem wir für $N\equiv 1 \bmod 2$ die Randsummen 1.Ordnung gradzahlig und minimal ansetzen bis auf die I_k-te Stufe (k=1,2), der eine maximale Beobachtungshäufigkeit zugewiesen wird. Setze $|a_1 - a_2| = \min$.

(c) Durch die Aufteilung der Matrix der Beobachtungszahlen N_{12} mit Hilfe von C und D in Teilmatrizen mit gradzahligen Werten und Werten kongruent 1mod2 und der bezüglich dieser Aufteilung durchgeführten Definition von $S_{12}^{(k)}$ in der Formulierung des Satzes 2.3.3. erhalten wir:

(i) $R_1^{(1)}(d)(i_1), R_2^{(1)}(d)(i_2) \in \{-1,0,+1\}$ $\quad i_k=1,..,I_k, k=1,2, l=1,2$

(ii) $\sum_{i_1}\sum_{i_2}\sum_{j} s_j^{(1)}(i_1,i_2)s_j^{(2)}(i_1,i_2) \in \{-1,0,+1,2\}$

Damit wird die Determinante von $A_2(d)A_2^T(d)$ maximal und die Matrix $A_2(d)A_1^T(d)$ komponentenweise minimiert und daher auch die Matrix $A_2A_1^T(A_1A_1^T)^{-1}A_1A_2^T$ der Korrekturterme klein gehalten, da die Komponenten von $(A_1A_1^T)^{-1}$ von der Größenordnung

$1/N_1(i_1)$ bzw. $1/N_2(i_2)$ sind.

(d) Aus der Struktur von $(A_1A_1^T)^{-1}$ für proportionale Versuchspläne kennen wir die Komponente (I_1+I_2-1, I_1+I_2-1), nämlich $1/N_2(I_2)-(N-N_1(I_1))/(N\cdot N_1(I_1))$.
Wir zerlegen N derart, daß $N=a_1a_2$ mit $N_k(i_k)=a_kc_k(i_k)$ $k=1,2$ mit $|a_1-a_2|$ = minimal, was wegen der Ganzzahligkeitsvoraussetzung möglich ist. Mit der Definition

$$c_k(i_k) = 2 \quad i_k = 1,\ldots,I_k-1 \quad k=1,2$$

d.h. $N_k^*(i_k) = 2a_k \qquad i_k=1,\ldots,I_k-1 \quad k=1,2$

$$N_k^*(i_k) = N - 2a_k(I_k-1)$$

sind die Komponenten der $(I_1-1)\times(I_2-1)$ Teilmatrix von N_{12}^* kongruent Omod2. Als Folgerung ergibt sich für die Matrix $A_1A_1^T$: Nur die Komponenten (i,I_1+I_2-1) $(i=1,2)$ sind gleich 1 und damit verschieden von Null. Das bedeutet, daß die Matrix der Korrekturterme die Komponenten $e_{ij}=1/(N-2a_2(I_2-1))+2a_1(I_1-1)/N(N-2a_1(I_1-1)$ $(i,j=1,2)$ hat. Mit wachsendem N wird daher der Korrekturterm klein gegen det $A_2A_2^T$.

§ 2.4. Optimale Versuchspläne für den Regressionsparameter in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,[-1,+1])$ und $\bar{\Delta}(N,[-1,+1])$

In diesem Paragraphen betrachten wir Kovarianzmodelle mit einem zweifach-klassifizierten varianzanalytischen Anteil und einem linearen eindimensionalen Regressionsanteil, in dem die Kovariaten bei der Versuchseinstellung $t_1 \in T_1$ gleich sind. Solche Situationen treten z.B. auf, wenn bei Tierexperimenten das Gewicht als Kovariate berücksichtigt werden soll. Während in $\Delta(N_1,N_2,[-1,+1])$ jeweils $N(i_1,i_2)/2$ Versuchstiere mit großem bzw. kleinem Gewicht mit der Versuchseinstellung $t_1=(i_1,i_2)$ kombiniert werden, so ignoriert man gewisse Unverträglichkeiten zwischen Tieren unterschiedlichen Gewichts. Ein Ausweg bietet sich an, indem man die doppelte Anzahl, nämlich $2I_1 \cdot I_2$, von Behältnissen zur Verfügung stellt, was aber aus Kostengründen, Raummangel oder Verfälschung der Versuchsbedingungen eventuell abzulehnen ist. Eine Alternative dazu ist der hier zugrunde gelegte Ansatz:

$$s_j^{(k)}(i_1,i_2) = s^{(k)}(i_1,i_2) \quad (i_1,i_2) \in \mathbb{N}_{I_1} \times \mathbb{N}_{I_2}, \quad k=1,\ldots,K_2$$

In ähnlicher Weise wie bei Tierversuchen können auch bei Feldversuchen durch normierte Flächengrößen und begrenzte Flächen, sowie durch die Kostenabhängigkeit der Versuchseinstellungen (t_1,t_2) von der Anzahl der Wiederholungen Versuchspläne in $\bar{\Delta}$ bevorzugt werden.

Eine Übereinstimmung der Ergebnisse in Δ für die Informationsmatrix von β_2 mit Ergebnissen in $\bar{\Delta}$ finden wir nur dann (bzgl. N_{12}) wenn entweder $A_2=0$ oder $A_1A_2^T=0$. Diese Fälle sind bereits in §2.1. diskutiert. In allen anderen Situationen ist der Wert ($K_2=1$) der Informationsmatrix für β_2 in Δ immer größer als in $\bar{\Delta}$, was sich bereits aus der Definition von $A_1A_2^T$ ergibt.

Im Gegensatz zu § 2.3. setzen wir im folgenden keine ganzzahligen Versuchspläne N_{12} voraus, da die hier angewandten Methoden nicht kombinatorischer Art sind, sondern analytischer Art.

Als Gütekriterium verwenden wir G_{β_2}-Optimalität. Da die Informationsmatrix zu einer 1×1 Matrix entartet ist, stimmen natürlich G und D-optimale Pläne überein.

Wir betrachten zunächst ein Beispiel für die Berechnung eines optimalen Versuchsplans für β_2:

Beispiel 2.4.1.

Für $K_1=2$, $K_2=1$ und $I_1=I_2=2$ ist das Versuchsplanungsproblem sehr übersichtlich. Der interessierende Parameter β_2 hat die Informationsmatrix

$$I_{\beta_2}(d)=I_{\beta_2}(N_{12},S_{12})=A_2(d)\{E-A_1^T(d)(A_1(d)A_1^T(d))^{-1}A_1(d)\}A_2^T(d)=$$

$$=\frac{\frac{N(1,1)N(2,1)}{N_2(1)}\cdot\frac{N(1,2)N(2,2)}{N_2(2)}}{\frac{N(1,1)N(2,1)}{N_2(1)}+\frac{N(1,2)N(2,2)}{N_2(2)}}\{s(1,1)-s(1,2)-s(2,1)+s(2,2)\}^2$$

Die Auswahl der $\{s(i,j),i,j=1,2\}$ wird nach dem Lemma 2.3.1. durchgeführt. In diesem Falle ist S_{12}^* bis auf das Vorzeichen

eindeutig gegeben durch:

$$s^*(1,1)=-s^*(1,2)=-s^*(2,1)=s^*(2,2)=1$$

$$\forall N_{12}: I_{\beta_2}(N_{12},S^*_{12})=\max_{S_{12}} I_{\beta_2}(N_{12},S_{12}) = 16\frac{\alpha_1(N_{12})\cdot\alpha_2(N_{12})}{\alpha_1(N_{12})+\alpha_2(N_{12})}$$

mit $\alpha_i(N_{12}) := N(1,i)N(2,i)/N_2(i) \qquad i=1,2$

Der Lagrangeansatz

$$L(d,\lambda)=I_{\beta_2}(d)+\sum_{i_1=1}^{2}\lambda_{i_1}^{(1,2)}\left(\sum_{i_2=1}^{2}N(i_1,i_2)-N_1(i_1)\right)$$

$$+\sum_{i_2=1}^{2}\lambda_{i_2}^{(2,1)}\left(\sum_{i_1=1}^{2}N(i_1,i_2)-N_2(i_2)\right)$$

führt nach Eliminierung der Lagrangefaktoren auf die Bedingungsgleichung für N_{12}:

$$\frac{N(1,1)-N(2,1)}{N_2(1)}\ \alpha_2^2(N_{12}) = \frac{N(1,2)-N(2,2)}{N(2)}\ \alpha_1^2(N_{12})$$

Wir formulieren diese Aussagen als Satz.

Satz 2.4.2:

G_{β_2}-optimale Versuchspläne in Modellen der Kovarianzanalyse mit $K_1=2, K_2=1$, und linearer Regression $I_1=I_2=2$ sind in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,[-1,+1])$ charakterisiert durch $d^*=(N^*_{12},S^*_{12})$

(i) N^*_{12}, eindeutig bestimmt durch die Nullstelle $x_o = N^*(1,1) > 0$ von

$$P(x) = (N_2(1)-2x)(N_1(1)-x)^2(N_2(2)-N_1(1)+x)^2N_2(1)-$$
$$- (N_2(2)-2N_1(1)+2x)\ x^2(N_2(1)-x)^2N_2(2)$$

(ii) $S^*_{12} = \{s^*(1,1)=-s^*(1,2)=-s^*(2,1)=s^*(2,2)=1\}$

Bemerkung: Die Verallgemeinerung dieses Satzes auf Kovarianzmodelle mit beliebig vielen Stufen an beiden Faktoren ist möglich, indem die Struktur der Informationsmatrix ausgenutzt wird und eine Reduktion auf das in Satz 2.4.1. betrachtete Modell stattfindet.

Zunächst benötigen wir ein technisches Lemma zur Optimierung der Informationsmatrix, das das Verhalten des Quotienten von Produkt und Summe konkaver Funktionen beschreibt.

Lemma 2.4.3.: Sei $\varepsilon \geq \varepsilon' \geq 0$, $\delta \geq 0$. Ferner sei

$$f_{1\delta}(x) = x(N/2+\delta-x)/(N/2+\delta)$$
$$f_{2\varepsilon\delta}(x) = (x-\varepsilon-\delta)(N/2+\varepsilon-x)/(N/2-\delta)$$
$$f_{\varepsilon\delta}(x) = f_{1\delta}(x)f_{2\varepsilon\delta}(x)/(f_{1\delta}(x)+f_{2\varepsilon\delta}(x))$$

Dann gilt

$$f_{\varepsilon\delta}(x) \leq f_{\varepsilon',\delta}(x) \qquad x \in [N/4+\delta/2, N/4+\delta/2+\varepsilon']$$

Insbesondere ist $\max\limits_x f_{\varepsilon\delta}(x) \leq \max\limits_x f_{\varepsilon',\delta}(x)$.

Beweis:

Wir betrachten die Menge aller x für die

$$f_{\varepsilon\delta}(x) \leq f_{\varepsilon',\delta}(x) \qquad \varepsilon \geq \varepsilon'$$

gilt. Da nach geometrischen Überlegungen in $D:=[\varepsilon+\delta, N/2-\delta]$ x_o mit $f_{\varepsilon\delta}(x) = \max\limits_x f_{\varepsilon\delta}(x)$ liegt, beschränken wir unsere Untersuchung auf

$\{x: f_{\varepsilon\delta}(x) \leq f_{\varepsilon',\delta}(x)\} \cap D = \{x: f_{2\varepsilon\delta}(x) \leq f_{2\varepsilon',\delta}(x)\} \cap D =$

$= \{x: (x'-\varepsilon-\delta)(N/2+\varepsilon'-x') \leq (x'-\varepsilon-\delta)(N/2+\varepsilon-x')\} \cap D =$

$= \{x: \varepsilon+\delta \leq x \leq N/4+\delta/2+(\varepsilon'+\varepsilon)/2\}$

Da $f'_{\varepsilon\delta}(x) = (f^2_{1\delta} f'_{2\varepsilon\delta} + f'_{1\delta} f^2_{2\varepsilon\delta}) / (f_{1\delta}+f_{2\varepsilon\delta})^2$

und

$f'_{1\delta}(x) = 1-2x/(N/2+\delta)$, $f'_{2\varepsilon\delta}(x) = 1-(2x-\varepsilon-\delta)/(N/2-\delta)$

findet man

$f'_{1\delta}(N/4+\delta/2) = 0$ $\quad f'_{2\varepsilon',\delta}(N/4+\delta/2) = 2\varepsilon'/(N/2-\delta) > 0$

$f'_{1\delta}(N/4+\delta/2+\varepsilon') = -2\varepsilon'/(N/2)-\delta)$ $\quad f'_{2\varepsilon',\delta}(N/4+\delta/2+\varepsilon') = 0$

d.h. $\frac{d}{dx} f_{\varepsilon\delta}(x) > 0$ in $x_1 = N/4+\delta/2$ $\qquad \varepsilon' > 0$

< 0 in $x_2 = N/4+\delta/2+\varepsilon'$

$\Rightarrow x'_o$ mit $f_{\varepsilon',\delta}(x_o) = \max_x f_{\varepsilon',\delta}(x)$ liegt im Intervall $[x_1, x_2]$

und für alle $x \in [x_1, x_2]$ gilt

$f_{\varepsilon\delta}(x) \leq f_{\varepsilon',\delta}(x)$

Da sämtliche Funktionen stetig sind, folgt die Behauptung.

Der Hauptsatz dieses Paragraphen gibt notwendige Bedingungen für die Optimalität von $I_{\beta_2}(N_{12}, S_{12})$ an.

Satz 2.4.4: Seien $A^* \subset \{1,\ldots,I_1\}$ und $B^* \subset \{1,\ldots,I_2\}$ nicht leer, gegeben durch

$$\left| \sum_{A^*} N_1(i_1) - N/2 \right| = \min_{A \in \mathfrak{N}_{I_1}} \left| \sum_{A} N_1(i_1) - N/2 \right|$$

$$\left| \sum_{B^*} N_2(i_2) - N/2 \right| = \min_{B \in \mathfrak{N}_{I_2}} \left| \sum_{B} N_2(i_2) - N/2 \right|$$

Ferner sei (M^*_{12}, S^*_{12}) die Lösung des in Satz 2.4.2. betrachteten Versuchsplanungsproblems in $\bar{\Delta}(M_1, M_2, [-1,+1])$ mit den Randsummen 1.Ordnung

$$M_1(1) = \sum_{A^*} N_1(i_1) \qquad M_1(2) = \sum_{A^{*C}} N_1(i_1)$$

$$M_2(1) = \sum_{B^*} N_2(i_2) \qquad M_2(2) = \sum_{B^{*C}} N_2(i_2)$$

Dann sind G_{β_2}-optimale Versuchspläne in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,[-1,+1])$ mit linearer Regression charakterisiert durch $d^*=(N^*_{12},S^*_{12})$:

(i)

$$(i_1,i_2)=\begin{cases} N_1(i_1)N_2(i_2)M^*(1,1)/(\sum_{A^*}N_1(k)\sum_{B^*}N_2(k)) & (i_1,i_2)\in A^*\times B^* \\ N_1(i_1)N_2(i_2)M^*(1,2)/(\sum_{A^*}N_1(k)\sum_{B^{*C}}N_2(k)) & (i_1,i_2)\in A^*\times B^{*C} \\ N_1(i_1)N_2(i_2)M^*(2,1)/(\sum_{A^{*C}}N_1(k)\sum_{B^*}N_2(k)) & (i_1,i_2)\in A^{*C}\times B^* \\ N_1(i_1)N_2(i_2)M^*(2,2)/(\sum_{A^{*C}}N_1(k)\sum_{B^{*C}}N_2(k)) & (i_1,i_2)\in A^{*C}\times B^{*C} \end{cases}$$

(ii)

$$s^*(i_1;i_2) = \begin{cases} +1 & (i_1,i_2)\in A^*\times B^* \vee A^{*C}\times B^{*C} \\ -1 & (i_1,i_2)\in A^*\times B^{*C} \vee A^{*C}\times B^* \end{cases}$$

Bemerkung:

1. Die Matrix der Beobachtungszahlen ist durch A*,B* und deren Komplemente in vier Teilmatrizen aufgeteilt, in denen jeweils die Zellenbeobachtungshäufigkeiten proportional zu den zugehörigen Randsummen sind.

Sei

$N_1 = (90,15,15) \Rightarrow A^*=\{1\}$

$N_2 = (80,16,16,8) \Rightarrow B^*=\{1\}$

2. A* und B* sind nicht eindeutig. Ihre Bestimmung kann auf folgende Weise geschehen:

Sei oBdA $N_1(1) \leq N_1(2) \leq \ldots \leq N_1(i)$

(1) Zu $N_1(1)$ wähle i_1^* derart, daß

$$a_1 := \min_{i_1} \left| N/2 - \sum_{j_1 \in \{1, i_1\}} N_1(j_1) \right|$$

(2) Zu N(1) wähle i_1^*, i_2^* derart, daß

$$a_2 := \min_{i_1, i_2} \left| N/2 - \sum_{j_1 \in \{1, i_1, i_2\}} N_1(j_1) \right|$$

Setze dieses Verfahren fort, bis entweder $a_{i_o} = 0$ gilt, oder in der die Folge $(a_i)_{i=1,\ldots,I_1-1}$ ein i_o mit $a_{i_o+1} > a_{i_o}$ auftritt.

Dann definiere A als die Menge der zu a_{i_o} gehörenden Summationsindizes.

3. Für N=120

$N_1 = (45, 45, 15, 15)$

$N_2 = (40, 40, 24, 16)$

wenden wir das unter 2. gegebene Verfahren an:

$a_1 = |60 - 45 - 15| = 0$ $\qquad$ $a_1' = |60 - 40 - 16| = 4$

$a_2' = |60 - 40 - 16 - 24| = 20$

$A = \{1,3\}(\{1,4\})$ $\qquad$ $B = \{1,4\}\ (\{2,4\})$

4. Beispiel 1:

Für N=120 und $I_1 = I_2 - 1 = 3$ geben wir einen ganzzahligen Versuchsplan an, der besser ist als der proportionale.

Die Matrix der Beobachtungszahlen des proportionalen Versuchsplans sei N_{12}^{p}, die des ganzzahligen G_{β_1}-optimalen N_{12}^{*g}.

$$N_{12}^{*g} = \begin{pmatrix} 64 & 10 & 10 & 6 \\ 8 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 3 & 3 & 1 \end{pmatrix} \qquad N_{12}^{p} = \begin{pmatrix} 60 & 12 & 12 & 6 \\ 10 & 2 & 2 & 1 \\ 10 & 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Es besteht die folgende Ungleichung unter den Informationsmatrizen von $N_{12}^{*}, N_{12}^{*g}, N_{12}^{p}$:

$$I_{\beta_2}(N_{12}^{*},S_{12}^{*})=85.1 > I_{\beta_2}(N_{12}^{*g},S_{12}^{*g})=84.55 > I_{\beta_2}(N_{12}^{p},S_{12}^{p})=80.0$$

Beispiel 2:

Für den unter 3. angegebenen Vektor von Randsummen 1.Ordnung eines Modells mit $I_1=I_2=4$ stimmen der G_{β_2}-optimale und der proportionale Versuchsplan überein (vgl. Folgerung 2.4.5.):

$$I_{\beta_2}(N_{12}^{*},S_{12}^{*}) = I_{\beta_2}(N_{12}^{p},S_{12}^{p}) = 119,475$$

Im Vergleich zum gleichen Versuchsplanungsproblem in $\Delta(N_1,N_2,[-1,1])$ erhalten wir für die Informationsmatrix

$I_{\beta_2}^{\Delta}(N_{12},S_{12}) = 119.82$

Da der Wert von $I_{\beta_2}(N_{12},S_{12})$ für $a_{i_o} \downarrow 0$ (vgl. Bem. 2) gegen N konvergiert, entspricht die Güte von Versuchsplänen in $\bar{\Delta}$ der in Δ für $a_{i_o} \to 0$. Da dieses im Falle von Modellen mit vielen Stufen an den einzelnen Faktoren dann zutrifft, falls unter diesen nicht eine Stufe stark bevorzugt wird: $N_k(i_k) \leq N/2 \quad i_k=1,\ldots,I_k, \; k=1,2$ so kann man sich auf die Versuchsplanung in $\bar{\Delta}$ beschränken (Vorteile: siehe § 2.1.)

Beweis:

Sei $A=\{1,2,\ldots,a\} \subset_{*} \mathbb{N}_{I_1}$, $B=\{1,2,\ldots,b\} \subset_{*} \mathbb{N}_{I_2}$, was sich durch Umindizierung der Komponenten von β_2 erreichen läßt. Wir definieren einen $I_1 + I_2 - 1$ Vektor $R=R(N_{12},S_{12})$ von Hilfsvariablen durch

$$R(d) = A_2(d)A_1^T(d)(A_1(d)A_1^T(d))^{-1} =$$

$$\left(\sum_{i=1}^{I_2} N(1,i)s(1,i),\ldots,\sum_{i=1}^{I_2} N(I_1-1,i)s(I_1-1,i),\right.$$

$$\left.\sum_{i=1}^{I_1} N(i,1)s(i,1),\ldots,\sum_{i=1}^{I_1} N(i,I_2)s(i,I_2)\right)(A_1(d)A_1^T(d))^{-1}$$

Nach Lemma 2.3.1. können wir die Komponenten der Matrix S_{12} aus der Menge $\{-1,+1\}$ nehmen. Wir setzen zunächst für $d \in \bar{\Delta}$

$$S_{12}=S_{12}(A,B) \ni s(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & (i_1,i_2) \in A\times B \cup A^c \times B^c \\ -1 & (i_1,i_2) \in A\times B^c \cup A^c \times B \end{cases}$$

voraus. Damit ergibt sich für $d=(N_{12},S_{12}(A,B))$

$$R(d)= (R_1(d),R_2(d)) =$$

$$((R_{1i}(d))_{i=1,..,I_1-1},(R_{2i}(d))_{i=1,..,I_2})=A_2(d)A_1^T(d)(A_1(d)A_1^T(d))$$

$$=((2\sum_{i_2=1}^{I_2} N(i_1,i_2)-N_1(i_1))_{i_1=1,..,a},(N_1(i_1)-2\sum_{i_2=1}^{I_2}N(i_1,i_2))_{i_1=a+1,..,}$$

$$(2\sum_{i_1=1}^{I_1} N(i_1,i_2)-N_2(i_2))_{i_2=1,..,b},(N_2(i_2)-2\sum_{i_1=1}^{I_1}N(i_1,i_2))_{i_2=b+1,..,I}$$

$$\times (A_1(d)A_1^T(d))^{-1}$$

Mit dieser Definition von R mit $S_{12}(A,B)$ haben wir eine einfache Darstellung der Lagrangefunktion:

$$L(d,\lambda) = L(N_{12},S_{12},\lambda) = A_2(d)A_2^T(d)A_2^T(d) - R(d)A_1(d)A_2^T(d) +$$

$$\sum_{i=1}^{I_1} \lambda_i^{(1,2)} \left(\sum_{j=1}^{I_2} N(i,j) - N_1(i) \right) + \sum_{j=1}^{I_2} \lambda_j^{(2,1)} \left(\sum_{i=1}^{I_1} N(i,j) - N_2(j) \right)$$

Unter Verwendung der Rechenregel für die Differentiation von Matrizen

$$\frac{d}{dx} A(x)B^{-1}(x)A^T(x) =$$

$$\left(\frac{d}{dx}A(x)\right)B^{-1}(x)A^T(x) + A(x)B^{-1}(x)\left(\frac{d}{dx}A(x)\right)^T -$$

$$-A(x)B^{-1}(x)\frac{d}{dx}B(x)B^{-1T}(x)A(x)$$

liefert die Eliminierung der Lagrangefaktoren ein System von Gleichungen für N_{12} in Abhängigkeit von $S_{12}(A,B)$.

Bemerkung:

Mit der Hilfsvariablen R wird das Beispiel 2.4.1. in der folgenden Weise behandelt:

$$I_{\beta_2}(N_{12},S_{12}) = N-(R_{11},R_{21},R_{22})A_1A_2^T$$

$$\frac{\partial L}{\partial N(1,1)} = 2R_{11}R_{21} - 4R_{11} - 4R_{21} + \lambda_1^{(1,2)} + \lambda_1^{(2,1)}$$

$$\frac{\partial L}{\partial N(1,2)} = 2R_{11}R_{22} + 4R_{22} + \lambda_1^{(1,2)} + \lambda_2^{(2,1)}$$

$$\frac{\partial L}{\partial N(2,i_2)} = \lambda_2^{(1,2)} + \lambda_{i_2}^{(2,1)} \qquad i_2 = 1,2$$

Als Bestimmungsgleichung für (R_{11},R_{21},R_{22}) erhalten wir aus $\{\partial L/\partial N(i_1,i_2)=0, i_k=1,2,\ k=1,2\}$

$$(2.4) \qquad R_{11}(R_{21}-2-R_{22}) = 2(R_{21}+R_{22})$$

Aus der Definition von R ist ersichtlich, daß die Beziehungen

$$
\begin{aligned}
R_{11}N_1(1)+R_{21}N(1,1)+R_{22}N(1,2) &= 2N(1,1)-N_1(1)\\
R_{11}N(1,1)+R_{21}N_2(1) &= 2N(1,1)-N_2(1) \qquad (2.5)\\
R_{11}N(1,2)+R_{22}N_2(2) &= N_2(2)-2N(1,2)
\end{aligned}
$$

erfüllt sein müssen.

Die Lösung des Gleichungssystems (2.4), (2.5) gibt uns die Bedingung

$$\frac{N^*(1,1)-N^*(2,1)}{N_2(1)}\left\{\frac{N^*(1,2)N^*(2,2)}{N_2(2)}\right\}^2=\frac{N^*(1,2)-N^*(2,2)}{N_2(2)}\left\{\frac{N^*(1,1)N^*(2,1)}{N_2(1)}\right\}$$

wie sie in Beispiel 2.4.1. über die explizite Berechnung von $I_{\beta_2}(d)$, die die Inversion von $A_1A_1^T$ einschloß, abgeleitet wurde.

Sei $\bar{A}^C:=A^C-\{I_1\}$.

I.

$$\frac{\partial L}{\partial N(i_1,i_2)}=-4R_{1i_1}-4R_{2i_2}+2R_{1i_1}R_{2i_2}+\lambda_{i_1}^{(1,2)}+\lambda_{i_2}^{(2,1)} \qquad (i_1,i_2)\in A\times B$$

$$\frac{\partial L}{\partial N(i_1,i_2)}=4R_{2i_2}+2R_{1i_1}R_{2i_2}+\lambda_{i_1}^{(1,2)}+\lambda_{i_2}^{(2,1)} \qquad (i_1,i_2)\in A\times B^C$$

$$\frac{\partial L}{\partial N(i_1,i_2)}=4R_{1i_1}+2R_{1i_1}R_{2i_2}+\lambda_{i_1}^{(1,2)}+\lambda_{i_2}^{(2,1)} \qquad (i_1,i_2)\in \bar{A}^C\times B$$

$$\frac{\partial L}{\partial N(i_1,i_2)}=2R_{1i_1}R_{2i_2}+\lambda_{i_1}^{(1,2)}+\lambda_{i_2}^{(2,1)} \qquad (i_1,i_2)\in \bar{A}^C\times B^C$$

$$\frac{\partial L}{\partial N(I_1,i_2)}=\lambda_{I_1}^{(1,2)}+\lambda_{i_2}^{(2,1)} \qquad i_2=1,\ldots,I_2$$

Das Gleichungssystem $\{\partial L(d,\lambda)/\partial N(i_1,i_2)=0,\ i_k=1,..,I_k,\ k=1,2\}$ ist äquivalent zu

II.

(i) $R_{1i_1}(R_{2i_2}-R_{2j_2})=2(R_{2i_2}-R_{2j_2})$ $i_1\in A$ $i_2,j_2\in B\times B^c$

(ii) $R_{1i_1}(R_{2i_2}-R_{2j_2})=0$ $i_1\in\bar{A}^c$ $i_2,j_2\in B\times B^c$

(iii) $R_{1i_1}(R_{2i_2}-2-R_{2j_2})=2(R_{2j_2}+R_{2i_2})$ $i_1\in A$ $i_2\in B$ $j_2\in B^c$

(iv) $R_{1i_1}(2+R_{2i_2}-R_{2j_2})=0$ $i_1\in\bar{A}^c$ $i_2\in B$ $j_2\in B^c$

Aus (i) leiten wir die Gleichheit von R_{2i_2} für alle $i_2\in B$, sowie die Gleichheit von R_{2i_2} für $i_2\in B^c$ ab. Daraus folgt mit (iii), daß R_{1i_1}=const. für $i_1\in A$. Wie man leicht nachrechnet, ist für $i_2\in B, j_2\in B^c$

$$R_{2i_2}+2-R_{2j_2}\neq 0$$

d.h. $R_{1i_1}=0$ für $i_1\in\bar{A}^c$ wegen (iv).
Mit diesen Beziehungen der R_{ij} kombinieren wir die Definitionsgleichung

$$R(A_1A_1^T) = A_2A_1^T$$

und eliminieren die Hilfsvariablen R_{1i}, R_{2j}:

III.

(i) $R_{11}N_1(i_1)+R_{21}\sum_B N(i_1,i_2)+R_{2b+1}(N_1(i_1)-\sum_B N(i_1,i_2)) = 2\sum_B N(i_1,i_2)-N_1(i_1)$ $i_1\in A$

(ii) $R_{21}\sum_B N(i_1,i_2)+R_{2b+1}(N_1(i_1)-\sum_B N(i_1,i_2)) = N_1(i_1)-2\sum_B N(i_1,i_2)$ $i_1\in\bar{A}^c$

(iii) $R_{11}\sum_{A}N(i_1,i_2)+R_{21}N_2(i_2) = 2\sum_{A}N(i_1,i_2)-N_2(i_2) \quad i_2\in B$

(iv) $R_{11}\sum_{A}N(i_1,i_2)+R_{2b+1}N_2(i_2)=N_2(i_2)-2\sum_{A}N(i_1,i_2) \quad i_2\in B^c$

Die Zusammenfassung von III(ii),(iii) in Kombination mit (iv) führt über

$$R_{21}=-1+(1-R_{2b+1})(N_1(i_1)-\sum_{B}N(i_1,i_2))/(\sum_{B}N(i_1,i_2)) \qquad i_1\in\bar{A}^c$$

$$R_{21}=-1+(2-R_{11})\sum_{A}N(i_1,i_2)/N_2(i_2) \qquad i_2\in B$$

zu zwei Bedingungsgleichungen

(1) $\sum_{A} N(i_1,i_2)/N_2(i_2) = \sum_{A} N(i_1,j_2)/N_2(j_2) \quad i_2,j_2\in B\vee B^c$

(2) $\sum_{B} N(i_1,i_2)/N_1(i_1) = \sum_{B} N(j_1,i_2)/N_1(j_1) \quad i_1,j_1\in A\vee\bar{A}^c$

Mit diesen Bedingungen (1), (2) läßt sich das System III. durch folgende Definitionen

$$M_1(1) = \sum_{A} N_1(i_1) \qquad M_1(2) = N-M_1(1)$$

$$M_2(1) = \sum_{B} N_2(i_2) \qquad M_2(2) = N-M_2(1)$$

$$M(1,1)=\sum_{A}\sum_{B} N(i_1,i_2) \qquad M(1,2) = \sum_{A}\sum_{B^c} N(i_1,i_2)$$

auf die Form bringen, die in der Bemerkung zum Fall $I_1=I_2=2$ als Bedingungsgleichung für den Vektor R auftritt. Das mit (1),(2) auf vier Gleichungen reduzierte System III. hat den Rang drei, d.h. die Bedingung III(ii) kann aus den anderen konstruiert werden. Die Lösung des Versuchsplanungsproblems wie in Satz 2.4.2. angegeben, liefert zu M, M in Abhängigkeit von A,B ein optimales Paar $(M^*_{12}(A,B),S^*_{12}(A,B))$, mit dessen Hilfe wir $(N^*_{12}(A,B),S^*_{12}(A,B))$ unter Verwendung von

(1),(2) definieren.

Es bleibt zu zeigen:

Für $M_1^*(1) = \sum_{A^*} N_1(i_1)$, $M_2^*(1) = \sum_{B^*} N_2(i_2)$ gilt

$I_{\beta_2}(N_{12}(A,B),S_{12}(A,B)) \leq I_{\beta_2}(N_{12}^*(A,B)^*,S_{12}(A^*,B^*))$ für alle $A \in N_{I_1}, B \in N_{I_2}$

Um diese Ungleichung nachzuweisen, setzen wir in Lemma 2.4.3.

$M_1(1) = N/2+\varepsilon$, $M_2(1) = N/2+\delta$

$M_1^*(1) = N/2+\varepsilon'$, $M_2^*(1) = N/2+\delta'$

Durch zweimaliges Anwenden des Lemmas erhalten wir das Ergebnis des Satzes.

Folgerung 2.4.5:

G_{β_2}-optimale Versuchspläne in Modellen der Kovarianzanalyse mit $K_1=2$, $K_2=1$ und linearer Regression sind in $\Delta(N_1,N_2,[-1,+1])$ genau dann durch proportionale Beobachtungshäufigkeiten N_{12} charakterisiert, wenn gilt:

$\exists\, A = \{i_1,\ldots,i_r\} \subset N_{I_1}$ mit $\sum_A N_1(i_1) = N/2$

oder

$\exists\, B = \{j_1,\ldots,j_s\} \subset N_{I_2}$ mit $\sum_B N_2(j_2) = N/2$

Bemerkung: Im allgemeinen sind also proportionale Versuchspläne nicht G_{β_2}-optimal. Je besser N/2 durch $\sum_A N_1(i)$ approximiert wird, umso größer ist der Wert der Informationsmatrix. Wir betrachten etwa

$N_1 = (70,30)$ $\quad A = \{1\}$

$N_2 = (40,60)$ $\quad B = \{1\}$

$I_{\beta_2}(N_{12},S_{12}) = 82.01 > 80,64 = I_{\beta_2}(N_{12}(\text{prop.}),S_{12})$

Dabei ist N^*_{12} eindeutig bestimmt durch $N^*(1,1) = 25{,}84$, der proportionale Versuchsplan durch $N^p(1,1) = 28{,}00$. Auch der beste unter den ganzzahligen Versuchsplänen ist mit $I_{\beta_2}(N^g_{12}, S_{12}) = 82.001$ und $N^{*g}(1,1) = 26{,}00$ noch wesentlich besser als der proportionale.

Beweis:

Die Definitionsgleichung der R_{1i}, R_{2i} hat unter Verwendung der Eigenschaften proportionaler Versuchspläne die Form:

$$R_{11}N+R_{21}\sum_B N_2(j)+R_{2b+1}(N-\sum_B N_2(j)) = 2\sum_B N_2(j) - N$$

$$R_{21}\sum_B N_2(j)+R_{2b+1}(N-\sum_B N_2(j)) = N-2\sum_B N_2(j)$$

$$R_{11}\sum_A N_1(i)+R_{21}N = 2\sum_A N_1(i)-N$$

$$R_{11}\sum_A N_1(i)+R_{2b+1}N=N-2\sum_A N_1(i)$$

Mit $R_{11}=-2+4\sum_B N_2(j)/N$

$$R_{21}=-1+4\sum_A N_1(i)(1-\sum_B N_2(j)/N)/N$$

$$R_{2b+1}=1-4\sum_A N_1(i)\sum_B N_2(j)/N^2$$

eingesetzt in die Bestimmungsgleichung

$$R_{11}(R_{21}-2-R_{2b+1}) = 2(R_{21}+R_{2b+1})$$

finden wir eine Bedingung an die Randsummen 1.Ordnung:

$$(N-2\sum_B N_2(j))(1-\sum_A N_1(i)/N) = (\sum_A N_1(i)/N)(N-2\sum_B N_2(j))$$

Diese Gleichung besteht nur dann, wenn entweder $\sum_A N_1(i)=N/2$ oder $\sum_B N_2(j) = N/2$ erfüllt ist.

Folgerung 2.4.6:

G_{β_2}-optimale Versuchspläne in $\Delta(N,[-1,+1])$ bei $K_2=1$, $K_1=2$ und linearer Regression sind charakterisiert durch

(i) N^*_{12}, das den Bedingungen von Satz 2.4.4. mit A,B,N_1,N_2 derart, daß

$$\sum_A N_1(i) = N/2 \qquad \sum_B N_2(j) = N/2$$

gilt, genügt.

(ii) $S^*_{12} = S^*_{12}(A,B)$

Beweis:

Die Anwendung von Lemma 2.4.3. zusammen mit Satz 2.4.4. liefert die Behauptung. Es genügt, für $I_1=I_2=2$ die Informationsmatrix wie im Beispiel 2.4.1. zu maximieren.

$$I_{\beta_2}(N_{12},S_{12}) =$$

$$= 16N(1,1)N(1,2)N(2,1)N(2,2)/(N_2(1)N(1,2)N(2,2)+N_2(2)N(1,1)N(1,2))$$

$$= 16N_2(1)N_2(2)N_1(1)N_1(2)/N^3 = 16N_2(1)N_2(2)/4N$$

mit $N_{12}(\text{prop})$ und $\sum_A N_1(i)$. Bleibt zu setzen $\sum_B N_2(j)=N/2$ wodurch der Ausdruck $N_2(1)N_2(2)/N$ maximiert wird.

§ 2.5. Optimale Versuchspläne in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,[-1,+1]^{K_2})$ für β_2 bei $I_1=2$

In diesem Paragraphen beschäftigen wir uns mit Kovarianzmodellen, mit mehreren quantitativen unabhängigen linearen Faktoren, wie sie häufig in der biologischen und medizinischen Forschung auftreten (D.B.De Lury, Biometrics 4, C.R.Rao [10], Wishard, Biometrika 30).

Die Untersuchung betrifft Modelle mit zwei qualitativen Faktoren.

$$E\, X_j(i_1,i_2)=a^{(1)}_{i_1}+a^{(2)}_{i_2}+\gamma_1 s^{(1)}(i_1,i_2)+\ldots+\gamma_2 s^{(K_2)}(i_1,i_2)$$

$$i_k=1,\ldots,I_k,\ k=1,2$$

$$j=0,1,\ldots,N(i_1,i_2)$$

Um D_{β_2}-optimale Versuchspläne zu bestimmen, suchen wir zunächst eine Darstellung von $I_{\beta_2}(N_{12},(S^{(1)}_{12},\ l=1,\ldots,K_2))$, die es erlaubt, die Optimierung über N_{12} und S_{12} zu separieren.

Dieses ist notwendig, da wir nicht auf das Reduktionslemma aus § 2.3.1. verweisen können, in dessen Beweisführung das Verhalten konvexer Funktionen auf konvexen Mengen ausgenützt wurde (quadratische Form = $I_{\beta_2}(d)$). Für die Fälle, in denen die Determinante der Informationsmatrix verschwindet, werden die Parameter angegeben und ein Lösungsansatz mit G-Optimalität erstellt. Ein Lösungsansatz deshalb, da G_{β_2}-optimale Pläne nur in den Klassen existieren, für die gilt:

$$\exists \begin{matrix}\{i_1,\ldots,i_m\}\\ \{j_1,\ldots,j_n\}\end{matrix} : \sum_{l=1}^{m} N_1(i_l)=N/2 \;,\; \sum_{l=1}^{n} N_2(j_l)=N/2$$

Lemma 2.5.1:

In Modellen der Kovarianzanalyse mit $K_1=K_2=2$ mit unabhängigen linearen Regressionsfaktoren gilt für Versuchspläne $d=(N_{12},S_{12}^{(1)},S_{12}^{(2)})$ aus $\bar{\Delta}(N_1,N_2,[-1,+1]^2)$ mit $I_1=2, I_2$ bel.:

$$\det I_{\beta_2}(N_{12},S_{12}^{(1)},S_{12}^{(2)}) = \det I_{\beta_2}(N_{12},P_{12}) =$$

$$= \prod_{i_2=1}^{I_2} \alpha(i_2)\{ \sum_{1\le i<j\le I_2} \rho_{ij}^2 / \prod_{l\neq 1,i,j} \alpha(l) + \sum_{1\le i<j<k\le I_2} (\rho_{ij}-\rho_{ik}+\rho_{jk})^2 / \prod_{l\neq i,j,k} \alpha(l)\} / \sum_{i_2=1}^{I_2} \alpha(i_2)$$

wobei folgende Notation vorausgesetzt ist:

(i) $\alpha(i_2) := N(1,i_2)N(2,i_2)/N_2(i_2) \quad i_2=1,\ldots,I_2$

(ii) $\tau_{ij}=\tau_j-\tau_i=s^{(1)}(1,j)-s^{(1)}(2,j)-s^{(1)}(1,i)+s^{(1)}(2,i)$

$\sigma_{ij}=\sigma_j-\sigma_i=s^{(2)}(1,j)-s^{(2)}(2,j)-s^{(2)}(1,i)+s^{(2)}(2,i)$

$\rho_{ij}=\tau_i\sigma_j-\tau_j\sigma_i \qquad i,j=1,\ldots,I_2$

$P=((\rho_{ij})_{i,j=2,\ldots,I_2})$

Beweis:

In der Situation $I_1=2$, I_2 bel. läßt sich die Informationsmatrix für β_2 noch leicht bestimmen:

$$I_{\beta_2}(N_{12},S_{12}^{(1)},S_{12}^{(2)}) =$$

$$\left(\sum_{i_2=1}^{I_2}\alpha(i_2)\right)^{-1}\begin{pmatrix} \sum_{1\le i<j\le I_2}\alpha(i)\alpha(j)\tau_{ij}^2 & \sum_{1\le i<j\le I_2}\alpha(i)\alpha(j)\tau_{ij}\sigma_{ij} \\ \sum_{1\le i<j\le I_2}\alpha(i)\alpha(j)\tau_{ij}\sigma_{ij} & \sum_{1\le i<j\le I_2}\alpha(i)\alpha(j)\sigma_{ij}^2 \end{pmatrix}$$

Die Auswertung mittels Determinantenkriterium führt mit den Abkürzungen

$$\rho_{ijkl} := \tau_{ij}\sigma_{kl}\ \tau_{kl}\sigma_{ij} = \rho_{jl}-\rho_{il}-\rho_{jk}+\rho_{ik} \qquad 1\le i<j\le I_2$$

$$\rho_{1ijk} = \rho_{ik}-\rho_{ij} \qquad 1<k<l\le I_2$$

$$(i,j) < (k,l) :\Leftrightarrow \begin{cases} i<k & j,l \text{ bel.} \\ i=k & j<l \end{cases}$$

auf

$$\det I_{\beta_2}(N_{12},S_{12}^{(1)},S_{12}^{(2)}) =$$

$$= \Big\{ \sum_{\substack{1\le i<j\le I_2 \\ 1\le k<l\le I_2 \\ (i,j)<(k,l)}} \alpha(i)\alpha(j)\alpha(k)\alpha(l)\ (\tau_{ij}\sigma_{kl}-\tau_{kl}\sigma_{ij})^2 \Big\}/A$$

$$\text{mit } A := \Big(\sum_{i_2=1}^{I_2}\alpha(i_2)\Big)^2$$

$$= \Big(\sum_{i_2=1}^{I_2}\alpha(i_2)\Big)^{-2}\Big\{ \sum_{\substack{1\le i<j\le I_2 \\ 1\le k<l\le I_2 \\ (i,j)<(k,l)}} \alpha(i)\alpha(j)\alpha(k)\alpha(l)\ \rho_{ijkl}^2 \Big\}$$

Unter Ausnutzung der linearen Beziehungen der ρ_{ij} geht obiger Ausdruck über in die Form der Determinante der Informationsmatrix des Lemmas 2.5.1.

Mit Hilfe des Lagrangeansatzes

$$L(d,\lambda)=\det I_{\beta_2}(d)+\sum_{i_1=1}^{I_1}\lambda_{i_1}^{(1,2)}\Big(\sum_{i_2=1}^{I_2}N(i_1,i_2)-N_1(i_1)\Big)$$

$$\sum_{i_2=1}^{I_2}\lambda_{i_2}^{(2,1)}\Big(\sum_{i_1=1}^{I_1}N(i_1,i_2)-N_2(i_2)\Big)$$

folgt sofort der Charakterisierungssatz für D_{β_2}-optimale Versuchspläne in $\bar{\Delta}$.

Satz 2.5.2:

D_{β_2}-optimale Versuchspläne in $\Delta(N_1,N_2,[-1,+1]^2)$ bei unabhängiger linearer Regression und $I_1=2, I_2=4$ sind gegeben durch:

(i) N_{12}^*, eindeutig bestimmt durch die Lösung der Gleichung $(\{i,j,k,l\}=\{1,2,3,4\})$

$$(2N(1,i)-N_2(i))(\alpha(j)+\alpha(k))(a(j)+\alpha(l))/N_2(i) =$$

$$(2N(1,j)-N_2(j))(\alpha(i)+\alpha(k))(\alpha(i)+\alpha(l))/N_2(j)$$

(ii) $S_{12}^{*(l)}$ definiert durch $(l=1,2)$

$$s^{*(1)}(1,i)=-s^{*(1)}(2,i) = \begin{cases} +1 & i\in A \\ -1 & i\in B \end{cases}$$

$$s^{*(2)}(1,i)=-s^{*(2)}(2,i) = \begin{cases} +1 & i\in C \\ -1 & i\in D \end{cases}$$

Mit $A\cup B=N_{I_2}$, $C\cup D=N_{I_2}$

$\#A=\#B=\#C=\#D=2$ und $\#(A\cap C)=\#(B\cap C)=1$

Bemerkung:

(1) Mit $\alpha(1)=0$ liefert Satz 2.5.2. die Lösung des Versuchsplanungsproblems für $I_2=3$, $l=4$.

$(S_{12}^{*(1)}, S_{12}^{*(2)}$ derart, daß $\rho_{23}=4$ d.h.

$A \cup B = C \cup D = \{1,2,3\}$ mit $\#A=\#C=2$ und $\#A \cap C = 1$

(2) Im Falle $I_1=2$, $I_2=3$ ist durch die Beziehungsgleichung zu den linearen Relationen unter den $N(i_1,i_2)$ eine weitere gekommen, die N_{12}^* als Lösung eines Gleichungssystems von vollem Rang liefern.

Für $I_1=2$, $I_2=4$ ist ein Approximationsprogramm zur Lösung notwendig, da die Beziehungsgleichung aus Satz 2.5.2.(i) auch nach Ausnutzung der linearen Relationen für jedes Tupel (i,j) eine Funktion von drei Variablen, nämlich $N(1,i)$, $i \in \{i_1,i_2,i_3\} \subset \{1,2,3,4\}$ ist.

Satz 2.5.3.: D_{β_2}-optimale Versuchspläne in $\Delta(N_1,N_2,[-1,+1]^2)$ mit unabhängigen linearen Regressionsfaktoren sind gegeben durch:

(i) $N^*(1,i_2)/N_2(i_2)=N^*(1,j_2)/N_2(j_2) \quad i,j=4,\ldots,I_2$
wobei ObdA $|N/2-N_2(i_2)| \uparrow (i_2=1,\ldots,I_2)$

(ii) Sei M_{12}^* die Lösung für M_{12} des Versuchsplanungsproblems mit $I_2=4$, dessen Beziehungsgleichungen in Satz 2.5.2. formuliert sind, mit

$$M_2(i_2) = N_2(i_2) \qquad i_2=1,2,3$$

$$M_2(4) = \sum_{i_2=4}^{I_2} N_2(i_2)$$

$$N^*(i_1,i_2)=M^*(i_1,i_2) \quad i_1=1,2, \; i_2=1,2,3$$

$$\sum_{i_2=4}^{I_2} N^*(i_1,i_2) = M^*(i_1,4) \qquad i=1,2$$

iii) $S_{12}^{*(1)} \ni s^{*(1)}(1,i_2) = -s^{*(1)}(2,i_2) = \begin{cases} +1 & i_2=1,2 \\ -1 & i_2=3,4,\ldots,I_2 \end{cases}$

$$S_{12}^{*(2)} \ni s^{*(2)}(1,i_2) = -s^{*(2)}(2,i_2) = \begin{cases} +1 & i_2=1,3 \\ -1 & i_2=2,4,\ldots,I_2 \end{cases}$$

Beweis:

Die Behauptung folgt aus dem vorangegangenen Satz und dem Lagrangesatz. Ferner benötigen wir eine Aussage über die Maximalanzahl nichtverschwindender Komponenten von

$P=((\rho_{ij})_{i,j=2,\ldots,I_2})$

Bemerkung:

1. Die in der Darstellung von $I_{\beta_2}(N_{12},(S_{12}^{(k)},k=1,2))$ auftretenden Variablen ρ_{ij} sind dem Betrag nach durch 16 beschränkt:

$$\rho_{ij}=(\tau_i\sigma_j-\tau_j\sigma_i) = (t_{11}-t_{21})(s_{1j}-s_{2j}-s_{1i}+s_{2i}) -$$

$$(t_{1i}-t_{2i})(s_{11}-s_{21}-s_{1j}+s_{2j})+(t_{1j}-t_{2j})(s_{11}-s_{21}-s_{1i}+s_{2i})$$

mit $t_{ij}=s(i,j)$, $s_{ij}=s(i,j)$

Aus Symmetriegründen können wir setzen

$$t_{1i}=-t_{2i}, s_{1i}=-s_{2i} \quad i=1,\ldots,I_2 \quad t_{ij},s_{ij}\in[-1,+1]$$

$$\max|\rho_{ij}| = \max 4\{|s_{11}-s_{1i}|+|s_{11}-s_{1j}|+|s_{1j}-s_{1j}|\}$$

Die lineare Abhängigkeit der Summanden in der geschweiften Klammer und $|s_{1i}-s_{1j}| \in [0,2]$ liefern die Schranke 16 für ρ_{ij}.

Diese Schranke und die lineare Abhängigkeit von

$\rho_{ij},\rho_{ik},\rho_{jk}$ implizieren, daß

$\rho_{ij}-\rho_{ik}+\rho_{jk}\in[-16,+16]$

(2) Die Matrix P hat nach Definition eine verschwindende Hauptdiagonale. Die Maximalanzahl nichtverschwindender Komponenten vom Betrage 16 ist

$2[I_2/2][(I_2+1)/2]$

(3) Nach dem Lemma ist $\det I_{\beta_2}(N_{12},(S_{12}^{(k)}k=1,2))$ positiv linear in $\bar{\rho}(i,j,1) := \rho_{ij}^2 \qquad i,j=2,\ldots,I_2$

$$\bar{\rho}(i,j,k) := (\rho_{ij}-\rho_{ik}+\rho_{jk})^2 \qquad k=2,\ldots,I_2$$

für alle N_{12}. Die Determinante wird also maximal, indem sukzessive maximale $\alpha(i)\alpha(j)\alpha(k)$ mit maximalen $\bar{\rho}_{ikj}$ multipliziert werden

Beweis:

Seien $S_{12}^{(k)}$ (k=1,2) derart, daß P 2[I/2][I+1)/2] von Null verschiedene Komponenten hat.

oBdA $\rho_{2i} \neq 0 \qquad i=3,\ldots,I_2$

$\rho_{3i} \neq 0 \qquad i=4,\ldots,I_2$

d.h. die Indizes {1,2,3} sind aus ausgezeichnet:

In diesem speziellen Fall erhalten wir

$$\det I_{\beta_2}(N_{12},(S_{12}^{(k)}k=1,2))=$$

$$16^2\{\alpha(1)\alpha(2)\sum_{1\neq 1,2}^{I_2}\alpha(1)+\alpha(1)\alpha(3)\sum_{1\neq 1,2,3}^{I_2}\alpha(1)+\alpha(2)\alpha(3)\sum_{1\neq 1,2,3}^{I_2}\alpha(1)\}/\sum_{1=1}^{I_2}\alpha(1)$$

Der Lagrangeansatz führt nach Eliminierung der Lagrange-

faktoren auf das Gleichungssystem (2.6)

(i) $N(1,i)/N_2(i)=N(1,j)/N_2(j) \qquad i,j=4,5,\ldots,I_2$

(ii) $(N(1,i)-N(2,i))(\alpha(j)+\alpha(k)) \sum_{l\neq i,k} \alpha(l)/N_2(i) =$

$(N(1,j)-N(2,j))(\alpha(i)+\alpha(k)) \sum_{l\neq j,k} \alpha(l)/N_2(j)$

für $i,j,k\in\{1,2,3\}$ paarweise verschieden

(iii) $(N(1,i)-N(2,i))(\alpha(j)+\alpha(k))(\alpha(j)+\alpha(l))/N_2(i)=$

$(N(1,j)-N(2,j)) \sum_{s\neq j,k} \alpha(s) \sum_{s\neq j,l} \alpha(s)$

für $l,k,j\in\{1,2,3\}$ paarweise verschieden, $i=4,\ldots,I_2$

Folgerung 2.5.4.:

In Modellen der Kovarianzanalyse sind D_{β_2}-optimale Versuchspläne in $\Delta(N_1,N_2,[-1,+1]^2)$ mit $I_1=2$, I_2 bel. genau dann durch proportionale Versuchspläne gekennzeichnet, falls

(i) $N_1(1) = N_1(2) = N/2$

(ii) $N_2(i) = N/4 \qquad i=1,\ldots,3$

wobei $|N/2-N_2(i)| \uparrow i\to I_2$ vorausgesetzt ist.

Beweis:

(i) folgt trivial aus (2.6)

(ii) ergibt sich nach Einsetzen von Proportionalität in (2.6):

$N(1,i)/N_2(i) = N_1(1)/N \qquad i=4,\ldots,I_2$

$N_2^2(j)-N_2^2(i)+(N_2(j)-N_2(i)) \sum_{l=k,4,\ldots,I_2} N_2(l)=0 \quad i,j,k\in\{1,2,3\}$

$(N_2(j)+N_2(i))(N_2(j)+N_2(k))= \sum_{l\neq i,j} N_2(l) \sum_{l\neq j,k} N_2(l) \quad j,k,i\in\{1,2,3\}$

$\Leftrightarrow N = 2N_2(j)+N_2(i)+N_2(k) \quad . \qquad i,j,k\in\{1,2,3\}$

Die erste dieser Gleichungen stellt keine zusätzliche Bedingung an die Randsummen 1.Ordnung dar. Dagegen implizieren die anderen $N_2(i) = \text{const.} \qquad i=1,2,3$

$\Rightarrow \qquad N_2(i) = N/4 \qquad i=1,2,3$

Spezialfall:

Sei $I_1=I_2=2$ bei $K_1=2$, K_2bel.

mit unabhängigen linearen Regressionsfaktoren. Die Informationsmatrix hat die Form

$$I_{\beta_2}(N_{12},(S_{12}^{(k)},k=1,\ldots,K_2)) =$$

$$(((\sum_{i=1}^{2}\alpha(i))^{-1}\alpha(1)\alpha(2)\tau_{12}^{(k)}\tau_{12}^{(l)})_{k,l=1,K_2}) =$$

$$\frac{\alpha(1)\alpha(2)}{\alpha(1)+\alpha(2)}\ ((\tau_{12}^{(k)}\tau_{12}^{(l)})_{k,l=1,\ldots,K_2}$$

Folgerung 2.5.5.:

G_{β_2}-optimale Versuchspläne in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,[-1,+1]^{K_2})$ mit linearer unabhängiger Regression sind gekennzeichnet durch

(i) N_{12}^* eindeutig bestimmt durch $N^*(1,1)$, positive Nullstelle von

$$P(x)=x^2(N_2(1)-x)^2(2N_1(1)-2x-N_2(2))/N_2(1)-$$
$$-(N_1(1)-x)^2(N_1(2)-N_2(1)+x)^2(2x-N_2(1))/N_2(2)$$

(ii) $s^{*(k)}(1,1)=-s^{*(k)}(1,2)=-s^{*(k)}(2,1)=s^{*(k)}(2,2) = 1$

$k=1,\ldots,I_2$

Beweis:

Die quadratische Form

$$a^T I_{\beta_2}(N_{12},(S_{12}^{(k)},k=1,\ldots,K_2))\, a =$$

$$\frac{\alpha(1)\alpha(2)}{\alpha(1)+\alpha(2)} \{ \sum_{i=1}^{K_2} a_i^2 \tau_{12}^{(i)2} + 2 \sum_{1\le i<j\le I_2} a_i a_j \tau_{12}^{(i)} \tau_{12}^{(j)} \}$$

wird für $|a^T a| = 1$ für alle N_{12} maximal, falls gilt

$$\tau_{12}^{(k)} = 4 \text{ (bzw. } -4)$$

Dann bleibt noch die Maximierung von $\alpha(1)\alpha(2)/(\alpha(1)+\alpha(2))$ in $\Delta(N_1,N_2)$, die jedoch bereits in § 2.3 durchgeführt ist.

§ 3 Charakterisierung optimaler Versuchspläne für den ANOVA-Parameter in Kovarianzmodellen

§ 3.1. Allgemeine Problemstellung der Versuchsplanung für den ANOVA-Parameter β_1

Wir betrachten zunächst die Planung eines Experiments für die Schätzung des Gesamtparameters β_1 des korrespondierenden varianzanalytischen Modells in $\Delta\,(N_1,\ldots,N_{K_1};\,[-1,+1]^{K_2})$.
Nach § 1 ist die Informationsmatrix für β_1 gegeben durch:

$$I_{\beta_1}(d) = A_1(d)\left(E-A_2^T(d)\left(A_2(d)A_2^T(d)\right)^{-1}A_2(d)\right)A_1^T(d) =$$

$$= A_1(d)A_1^T(d) - A_1(d)A_2^T(d)\left(A_2(d)A_2^T(d)\right)^{-1}A_2(d)A_1^T(d)$$

Die Matrix $A_1A_2^T(A_2A_2^T)^{-1}A_2A_1^T$ ist nichtnegativ definit, denn

$\sigma^2(A_2A_2^T)^{-1}$ ist als Kovarianzmatrix von β_2 positiv semidefinit

$\Leftrightarrow \forall\, c^T \in \mathbb{R}^{p_2}: c^T(A_2A_2^T)^{-1}c \geq 0.$

$\Rightarrow$ Insbesondere für $c^T = a^TA_1A_2^T$, $a^T \in R^{p_1}$ gilt obige Beziehung, d.h.

$$\forall\, a \in R^{p_1}: a^TA_1A_2^T(A_2A_2^T)^{-1}A_2A_1^Ta \geq 0$$

also gilt für alle $d \in \Delta\,(N_1,\ldots,N_{K_1};[-1,+1]^{K_2})$

$$I_{\beta_1}(d) \leq A_1(d)A_1^T(d) \qquad (3.1)$$

Die Gleichheit in (3.1) gilt speziell dann, wenn

(a) $A_2(d) = 0$ oder

(b) $A_1(d)A_2^T(d) = 0$

In der Situation (a) ist das Kovarianzmodell zu einem Modell der Varianzanalyse entartet. In diesem Falle können die Ergebnisse über Versuchsplanung bei varianzanalytischen Modellen ver-

wendet werden, über die eine umfangreiche Literatur existiert (Kiefer [8], Kurotschka [10], Kurotschka/Dwyer[11])

Die unter (b) angegebene Lösung ist bei $K_1 = 2$, $K_2 = 1$ etwa gleichbedeutend mit

$$\sum_{i=1}^{I_1} \sum_{j=1}^{N(i,k)} f(s_j(i,k)) = 0 \qquad k = 1,\ldots,I_2$$

$$\sum_{i=1}^{I_2} \sum_{j=1}^{N(k,i)} f_i(s_j(k,i)) = 0 \qquad k = 1,\ldots,I_1$$

Diese Bedingungen an den Versuchsplan d sind jedoch nur unter besonders günstigen Voraussetzungen erfüllt, etwa für $f = id_{S_{12}}$ in $\bar{\Delta}$ für $K_2 = 1$:

(i) $N_1(i_1) = N/I_1$

$N_2(i_2) = N/I_2$ $\qquad i_k = 1,\ldots,I_k \quad k = 1,2$

$I_1 \equiv I_2 \equiv 0 \bmod 2$

(ii) $$s(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & (i_1,i_2) \in \mathbb{N}_{I_1/2} \times \mathbb{N}_{I_2/2} \cup (\mathbb{N}_{I_1/2} \times \mathbb{N}_{I_2/2})^c \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

Die Gauß-Markov-Schätzung von β_1 ist gegeben durch

$$\hat{\beta}_1(X(d)) = A_o(d)\{E(d)-A_2^T(A_2QA_2^T)^{-1}A_2Q(d)\}X(d)$$

mit $A_o(d) = (A_1A_1^T)^{-1}A_1(d)$

$Q(d) = E(d)-A_1^T(d)A_o(d)$

d.h. $\hat{\beta}_1(X) = \hat{\beta}_o(X)-A_oA_2^T\beta_2(X) \qquad \hat{\beta}_o = (A_1A_1^T)^{-1}A_1X$

Damit setzt sich der Gauß-Markov-Schätzer von β_1 linear aus der G-M-Schätzern für β_o, Parameter des korrespondierenden Modells der Varianzanalyse, und β_2 linear zusammen. Um die Kovarianzmatrix von $\hat{\beta}_1$ bezüglich eines der in § 1 angegebenen Kriterien zu minimieren, muß man die Kovarianzmatrizen von $\hat{\beta}_o$ und $\hat{\beta}_2$ minimieren. Die Matrizen Cov $\hat{\beta}_o$ und Cov $\hat{\beta}_2$ sind

jedoch über A_1 von einander abhängig, so daß i.a. keine getrennte Optimierung möglich ist. Die Ungleichung (3.1) zeigt, daß $A_2=0$ eine Lösung der Minimierungsaufgabe über $S_{12\ldots K_1}$ bedeutet. Dieses vernachlässigt aber die Existenz eines Regressionsanteils im Modell. Um dieses zu vermeiden, bietet sich als plausibler Ausweg an, die Werte der Kovariaten aus dem Reduktionslemma 2.3.1. zu verwenden.

Das in diesem Paragraphen betrachtete Versuchsplanungsproblem stellt sich damit so dar:

Gesucht ist ein Versuchsplan d^* in $\Delta(N_1,\ldots,N_{K_1},\{-1,+1\}^{K_2})$ mit

$$\Phi(I_{\beta_1}(d^*)) = \inf_{d \in \Delta} \Phi(I_{\beta_1}(d))$$

Als Kriterium verwenden wir D-Optimalität, da G-optimale Versuchspläne im allgemeinen nicht existieren, wie eine Bemerkung im § 3.3 zeigt.

§ 3.2. Optimale Versuchspläne für β_1 in $\Delta(N_1,N_2,\{-1,+1\}^k)$ und $\Delta(N,\{-1,+1\}^k)(k=1,2)$ unter Ganzzzahligkeitsvoraussetzung

Wie bereits in § 2.2. interessieren wir uns in Δ für ganzzahlige Versuchspläne. Zunächst geben wir als Vorbereitung der Charakterisierungssätze die benötigten Informationsmatrizen an.

I. Sei Δ vorausgesetzt.

1. $K_1 = 1$, K_2 bel.

$$I_{\beta_1}(d) = \operatorname{diag}(N(i),\ i=1,\ldots,I) - \left(\left(\sum_{j=1}^{N(i)} s_j^{(k)}(i)\right)_{\substack{k=1,\ldots,K_2\\ i=1,\ldots,I}}\right)\left(\left(\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{N(i)} s_j^{(l)}(i)s_j^{(k)}(i)\right)_{k,l=1,\ldots,K_2}\right)^{-1} \times \left(\left(\sum_{j=1}^{N(i)} s_j(i)\right)_{\substack{i=1,\ldots,I\\ k=1,\ldots,K_2}}\right)$$

2. $K_1 = 1$, $K_2 = 1$

$$I_{\beta_1}(d) = \left(\left(\delta_{ij}N(i) - \sum_{l=1}^{N(i)} s_1(i) \sum_{l=1}^{N(j)} s_1(j) \Big/ \sum_{\substack{l=1\\k=1}} s_1^2(i)\right)\right)_{i,j=1,\ldots,I}$$

3. $K_1 = 1$, $K_2 = 2$

$$I_{\beta_1}(d) = I_{\beta_1}(N_1,S_2) = \operatorname{diag}(N(i),i=1,..,I) - \frac{1}{D}\Bigg(\Bigg(\sum_{j=1}^{N(l)} s_j^{(1)}(l) \sum_{j=1}^{N(k)} s_j^{(1)}(k) \sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{N(i)} s_j^{(2)}(i) + \sum_{j=1}^{N(l)} s_j^{(2)}(l) \sum_{j=1}^{N(k)} s_j^{(2)}(k) \sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{N(i)} s_j^{(1)}(i) - C\Bigg)_{k,l=1,..,I}\Bigg)$$

mit $C = \left(\left(\sum_{j=1}^{} s_j^{(1)}(k) \sum_{j=1}^{} s_j^{(2)}(l) + \sum_{j=1}^{} s_j^{(1)}(l) \sum_{l=1}^{} s_j^{(2)}(k)\right)_{k,l=1,\ldots,I}\right)$

und $D = \sum_{\substack{j=1\\ i=1}}^{} s_j^{(1)^2}(i) \sum_{\substack{j=1\\ i=1}}^{} s_j^{(2)^2}(i) - \left\{\sum_{\substack{j=1\\ i=1}}^{} s_j^{(1)}(i) s_j^{(2)}(i)\right\}^2$

4. $K_1 = 2$, $K_2 = 1,2$

$$I_{\beta_1}(d) = \begin{pmatrix} \left((N_1(i)\delta_{ij})_{i=1,\ldots,I_1-1}^{j=1,\ldots,I_1-1}\right) & \left((N(i,j))_{i=1,\ldots,I_1-1}^{j=1,\ldots,I_2}\right) \\ \left((N(i,j))_{j=1,\ldots,I_2}^{i=1,\ldots,I_1-1}\right) & \left((N_2(i)\delta_{ij})_{i,j=1,\ldots,I_2}\right) \end{pmatrix}$$

$$- (R_1(d), R_2(d))(A_2(d)A_2^T(d))^{-1}(R_1^T(d), R_2^T(d))^T$$

mit $(R_{1i_1}(d))_k = \left(\sum_{i_2=1}^{I_2} \sum_{j=1}^{N(i_1,i_2)} s_j^{(k)}(i_1,i_2)\right)_{k=1,\ldots,K_2}$

$$(R_{2i_2}(d))_k = \left(\sum_{i_1=1}^{I_1} \sum_{j=1}^{N(i_1,i_2)} s_j^{(k)}(i_1,i_2)\right)_{k=1,\ldots,K_2}$$

$$A_2(d)A_2^T(d) = \left(\left(\sum_{i_1=1}^{I_1} \sum_{i_2=1}^{I_2} \sum_{j=1}^{N(i_1,i_2)} s_j^{(k)}(i_1,i_2) s_j^{(l)}(i_1,i_2)\right)\right)_{k,l=1,\ldots K_2}$$

II. 1.-4. für $\bar{\Delta}(N_1,\ldots,N_{K_1}, \{-1,+1\}^{K_2})$

ergeben sich durch Aufsummieren über j bei konstantem $s_j(\ ,\ )$.

Satz 3.2.1. Für Modelle der Kovarianzanalyse mit Parametern $K_1 = K_2 = 1$ sind D_{β_1}-optimale Versuchspläne $d^* = (N_1^*, S_1^*)$

(a) in $\Delta(N_1, \{-1,+1\})$ gegeben durch die Festlegung von S_1^*:

$$s_j^{(1)}(i) = \begin{cases} +1 & j=1,\ldots,[N_1(i)/2] \\ -1 & j=[N_1(i)/2]+1,\ldots,N_1(i) \end{cases} \qquad i = 1,\ldots,I$$

(b) in $\Delta(N, \{-1,+1\})$ gegeben durch

i) $N_1^*(i) = [N/I]+1 \qquad i = 1,\ldots,c$

$N_1^*(i) = [N/I] \qquad i = c+1,\ldots,I$

wobei c derart, daß $N \equiv c \bmod [N/I]$

ii) $S_1^* = S_1^*(N_1^*)$ wie unter (a)

Für Modelle der Kovarianzanalyse mit Parametern $K_1=1, K_2=2$ sind D_{β_1}-optimale Versuchspläne $d^* = (N_1^*, S_1^{*(1)}, S_1^{*(2)})$

(c) in $\Delta(N_1, \{-1,+1\}^2)$ gegeben durch die Festlegung von $S_1^{*(l)}$, $l=1,2$:

$$s_j^{(1)}(i) = \begin{cases} +1 & j=1,\ldots,[(N_1(i)+1)/2] \\ -1 & j=[(N_1(i)+1)/2],\ldots,N_1(i) \end{cases} \qquad i=1,\ldots,I$$

$$s_j^{(2)}(i) = \begin{cases} +1 & j\leq[([N_1(i)/2]+1)/2], j>[1+3/4N_1(i)] \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

für $i \in I_1 \cup I_2' \cup I_3' \cup I_4'$

$$s_j^{(2)}(i) = \begin{cases} -1 & j\leq[([N_1(i)/2]+1)/2[, j>[1+3/4N_1(i)] \\ +1 & \text{sonst} \end{cases}$$

für $i \in I_2'' \cup I_3'' \cup I_4''$

$I_1 = \{i : N_1(i) \equiv 0 \bmod 4\}$

$I_2 = \{i:N_1(i) \equiv 2 \bmod 4\} - I_1 = I_2' \cup I_2''$ $\quad \#I_2' - \#I_2'' \in \{0,1\}$

$I_3 = \{i:N_1(i) \equiv 1 \bmod 4\} = I_3' \cup I_3''$ $\quad |\#I_k' - \#I_k''| \leq 1$

$I_4 = \{i:N_1(i) \equiv 3 \bmod 4\} = I_4' \cup I_4''$ $\quad k = 3,4$

Falls $(\#I_2 \equiv 1 \bmod 2)$, sei $\#I_k' \leq \#I_k''$, $k=3,4$ sonst

$\#I_3' \leq \#I_3''$, $\#I_4' \geq \#I_4''$

(d) in $\Delta(N,\{-1,+1\}^2)$ gegeben durch

i) $N_1^*(i) = [N/I] + 1 \qquad i = 1,\ldots,c$

$N_1^*(i) = [N/I] \qquad i = c+1,\ldots,I$

wobei gilt $N \equiv c \bmod [N/I]$

ii) $S_1^{*(1)} = S_1^{*(1)}(N_1^*)$, $1 = 1,2$ wie unter (c)

Beweis:

(a) Die Determinante der Informationsmatrix $I_{\beta_1}(d)$ läßt sich für $K_1 = K_2 = 1$ in $\Delta(N_1,\{-1,+1\})$ aus I.2. leicht berechnen.

$$\det I_{\beta_1}(d) = \prod_{i=1}^{I} N_1(i)\{1-1/M \sum_{i=1}^{I} 1/N_1(i) \Big(\sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j(i)\Big)^2\}$$

$$\text{mit } M = \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j^2(i)$$

Daraus ergeben sich folgende Gleichungen:

$$\det I_{\beta_1}(d^*) = \det I_{\beta_1}(N_1^*,S_1^*) = \max_{d \in \Delta(N_1,\{-1,+1\})} \det I_{\beta_1}(N_1,S_1) =$$

$$= \prod_{i=1}^{I} N_1(i)\{1-\min_{S_1} 1/N \sum_{i=1}^{I} 1/N_1(i) \Big(\sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j(i)\Big)^2\}$$

$$= \prod_{i=1}^{I} N_1(i)\{1-1/N \sum_{i=1}^{I} 1/N_1(i) \min_{S_1} \sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j(i)\Big)^2\}$$

$$\overset{(*)}{=} \prod_{i=1}^{I} N_1(i)\{1-1/N \sum_{i=1}^{I} 1/N_1(i) \; 1_{\{N_1(j) \neq 0 \bmod 2\}}(N_1(i))\}$$

Die Gleichheit (*) erhalten wir, indem die Kovariaten für jedes i gleichmäßig auf -1 und +1 verteilt werden.

(b) Unter (a) ist eine beliebige Folge $N_1(i)$, i=1,...,I vorausgesetzt, daher ist es ausreichend, die $N_1(i)$ optimal zu bestimmen. Aus Gründen der Ganzzahligkeit von N_1, spielt der in geschweiften Klammern stehende Ausdruck bei der Optimierung keine Rolle. Um die Randbedingung $\sum_{i=1}^{I} N_1(i) = N$ zu erfüllen bei der Maximierung von $\prod_{i=1}^{I} N_1(i)$, definieren wir N_1^* wie in der Formulierung des Satzes.

(c) Durch die angegebene Festlegung von $S_1^{(1)}$, l = 1,2 wird

$$A_1A_2^T(A_2A_2^T)^{-1}A_2A_1^T$$

minimiert, da die Matrizen $A_1A_2^T$ durch die Definition von $S_1^{*(1)}$, l = 1,2 an den Komponenten i die Werte ± 1 annehmen, für die gilt $N_1(i) = 1 \bmod 2$. Und jede andere Auswahl von $S_1^{(i)}$ hätte an den gleichen Komponenten nichtverschwindende Elemente von mindestens gleich großem Betrag. Ferner ist die Matrix

$$A_2A_2^T = \begin{pmatrix} N & e \\ e & N \end{pmatrix} \qquad e = \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{N_1(i)} s_j^{(1)}(i)\, s_j^{(2)}(i)$$

bzgl. des Kriteriums D-Optimalität durch die angegebene Lösung minimiert, da $e \in \{-2,-1,0,1\}$ durch die Festlegung von $S_1^{*(1)}$ minimiert wird.

(d) ergibt sich aus der D_{β_1}-Optimalität von $N_1^*(i) = N/I$ in varianzanalytischen Modellen und der Forderung der Ganzzahligkeit von N_1^*.

Satz 3.2.2.: In Kovarianzmodellen mit $K_1 = 2$, $K_2 = 1$ sind Versuchspläne $d = (N_{12}, S_{12})$ genau dann asymptotisch D_{β_1}-optimal in

(a) $\Delta(N_1, N_2, \{-1,+1\})$, falls gilt

i) $N^*(i_1,i_2) = N_1(i_1)N_2(i_2)/N \quad i \le i_k \le I_k$, $k=1,2$

ii) Sei $\{i_1 : N_1(i_1) \equiv 1 \bmod 2\} = I_1' \cup I_1'' \quad \#I_1' - \#I_1'' \in \{0,1\}$

$\{i_2 : N_2(i_2) \equiv 1 \bmod 2\} = I_2' \cup I_2'' \quad \#I_2' - \#I_2'' \in \{0,-1\}$

$$s_j^*(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & j=1,\ldots,[N(i_1,i_2)/2] \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

für $(i_1,i_2) \in I_1' \times I_2' \cup I_1'' \times I_2''$

$$s_j^*(i_1,i_2) = \begin{cases} -1 & j=1,\ldots,[N(i_1,i_2)/2] \\ +1 & \text{sonst} \end{cases}$$

für $(i_1,i_2) \in (I_1' \times I_2' \cup I_1'' I_2'')^c$

(b) $\Delta(N,\{-1,+1\})$, falls gilt

i) $N_1^*(i_1) = [N/I_1] + 1 \qquad i_1 = 1,\ldots,c_1$

$N_1^*(i_1) = [N/I_1] \qquad i_1 = c_1+1,..,I_1$

$N_2^*(i_2) = [N/I_2] + 1 \qquad i_2 = 1,\ldots,c_2$

$= [N/I_2] \qquad i_2 = c_2+1,\ldots,I_2$

wobei c_k derart, daß $N \equiv c_k \bmod [N/I_k]$ $k=1,2$

und $N^*(i_1,i_2) = N_1^*(i_1)N_2^*(i_2)/N \quad 1 \le i_k \le I_k$, $k=1,2$

ii) $S_{12}^* = S_{12}^*(N_1^*,N_2^*)$ wie unter (a)

In Kovarianzmodellen mit $K_1 = 2$, $K_2 = 2$ sind Versuchspläne $d = (N_{12}, S_{12}^{(1)}, S_{12}^{(2)})$ genau dann asymptotisch D_{β_1}-optimal

(c) in $\Delta(N_1,N_2,\{-1,+1\}^2)$, falls gilt

i) $N^*(i_1,i_2) = N_1(i_1)N_2(i_2)/N \quad 1\le i_k\le I_k, \quad k=1,2$

ii) $S_{12}^{*(1)}$ wie unter (a)

Sei $N = a\cdot b$ mit $N_1(i_2) = a\cdot c_1(i_1), N_2(i_2) = b\cdot c_2(i_2)$

$J_k' \cup J_k'' = \{i_k : c_k(i_k) \equiv 0 \bmod 2\} \qquad k = 1,2$

$I_k' \cup I_k'' = \tilde{I}_k \cup \tilde{\tilde{I}}_k = \{i_k : c_k(i_k) \equiv 1 \bmod 2\} = \{i_1,\ldots,i_{L_k}\}$

$k=1,2$

wobei $I_k' = \{i_1,\ldots,i_{l_k}\}$ mit $l_k = [L_k/2]$

$\tilde{I}_k = \{i_1,\ldots,i_{r_k}\} \cup \{i_{l+1},\ldots,i_{s_k}\}$ mit

$r_k = [l_k/2], s_k = [(L_k - l_1)/2]$

$\#I_k'' - \#I_k', \ \#\tilde{I}_k - \#\tilde{\tilde{I}}_k, \ \#J_k' - \#J_k'' \in \{0,1\} \quad k=1,2$

$$s_j^{*(2)}(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & j\le[(N(i_1,i_2)/2]+1)/2] \\ & j>[1+3/4N(i_1,i_2)] \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

für $(i_1,i_2) \in (J_1' \cup \tilde{I}_1) \times (J_2' \cup \tilde{I}_2)$

Für alle anderen Paare $(i_1,i_2) \in \mathbb{N}_{I_1} \times \mathbb{N}_{I_2}$:

$$s_j^{*(2)}(i_1,i_2) = \begin{cases} -1 & j\le[(N(i_1,i_2)/2]+1)/2] \\ & j>[1+3/4N(i_1,i_2)] \\ +1 & \text{sonst} \end{cases}$$

(d) in $\Delta(N,\{-1,+1\}^2)$, falls gilt

i) $N^*(i_1,i_2) = N_1^*(i_1)N_2^*(i_2)/N \quad 1\le i_k\le I_k, \quad k=1,2$

mit N_1^*, N_2^* wie unter (a)

ii) $S_{12}^{*(1)} = S_{12}^{*(1)}$ (N_1^*,N_2^*) wie unter (c).

Beweis:

(a) Sei $K_1 = 2$, $K_2 = 1$. Wir verwenden die unter I.4. angegebene Form der Informationsmatrix:

$$I_{\beta_1}(d) = I_{\beta_1}(N_{12},S_{12}) =$$

$$\begin{pmatrix} ((N_1(i)\delta_{ij}-R_{1i}R_{1j}/N)_{1\le i\le I_1-1}^{1\le j\le I_1-1} & ((N(i,j)-R_{1i}R_{2j}/N)_{1\le i\le I_1-1}^{1\le j\le I_2} \\ ((N(i,j)-R_{1j}R_{2i}/N)_{1\le i\le I_2}^{1\le j\le I_1-1} & ((N_2(i)\delta_{ij}-R_{2i}R_{2j}/N)_{1\le i\le I_2}^{1\le j\le I_2} \end{pmatrix}$$

mit den Hilfsvariablen

$$R_{1i_1} = R_{1i_1}(d) = \sum_{i_1=1}^{I} \sum_{j=1}^{N(i_1,i_2)} s_j(i_1,i_2) \qquad i_1=1,\ldots,I_1-1$$

$$R_{2i_2} = R_{2i_2}(d) = \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{N(i_1,i_2)} s_j(i_1,i_2) \qquad i_2=1,\ldots,I_2$$

Durch die im folgenden beschriebene Wahl von $S'_{12}(N_{12})$ legen wir $(R_{1i})_i, (R_{2i})_i$ so fest, daß die Determinante von $I_{\beta_1}(d)$ maximal wird.

$$s'_j(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & j=1,\ldots,[N(i_1,i_2)/2] \\ & (i_1,i_2)\in I'_1\times I'_2 \\ -1 & j=[N(i_1,i_2)/2]+1,\ldots,N(i_1,i_2) \end{cases} \quad I''_1\times I''_2$$

$$s'_j(i_1,i_2) = \begin{cases} -1 & j=1,\ldots,[N(i_1,i_2)/2] \\ & \text{sonst} \\ +1 & j=[N(i_1,i_2)/2]+1,\ldots,N(i_1,i_2) \end{cases}$$

Dabei sind I'_1, I''_2, I'_2, I''_2 so gewählt:

$$\{1,\ldots,I_1\} \supset I'_1 \cup I''_1 = \{i_1 : N_1(i_1) \equiv 1 \bmod 2\}$$

$$\{1,\ldots,I_2\} \supset I'_2 \cup I''_2 = \{i_2 : N_2(i_2) \equiv 1 \bmod 2\} \quad \begin{matrix} \#I'_1-\#I''_1\in\{0,1\}, \\ \#I'_2-\#I''_2\in\{-1,0\} \end{matrix}$$

Dadurch ist $I_{\beta_1}(d') = I_{\beta_1}(N_{12}, S'_{12}(N_{12}))$ darstellbar als

$$I_{\beta_1}(d') = \begin{pmatrix} P_1 & Q \\ Q^T & P_2 \end{pmatrix} \qquad \text{wobei}$$

$$P_1 = \left((N_1(i)\delta_{ij} - \frac{1}{N}\operatorname{sgn}(i,j)1_{\{N_1(i)=1 \bmod 2\}}(N_1(k))_{1\le i\le I_1-1}\right)_{1\le j\le I_1-1}$$

$$P_2 = \left((N_2(i)\delta_{ij} - \frac{1}{N}\operatorname{sgn}(i,j)1_{\{N_2(i)=1 \bmod 2\}}(N_2(k))_{1\le i\le I_2}\right)_{1\le j\le I_2}$$

$$Q = \left((N(i,j) - \frac{1}{N}\operatorname{sgn}(i,j)\,1_{\{N_1(k)=N_2(1)=1 \bmod 2\}}(N_1(i),N_2(j)))_{1\le i\le I_2}\right)_{1\le j\le I_1-1}$$

Dabei ist

$$\operatorname{sgn}(i,j) = \begin{cases} - & (i,j) \in I'_1 \times I''_1 \vee I'_2 \times I''_2 \vee I'_1 \times I''_2 \vee I''_2 \\ + & \text{sonst} \end{cases}$$

Die Determinante der Informationsmatrix zu $d' = (N_{12}, S'_{12}(N_{12}))$ ist für große Stichprobenumfänge N asymptotisch gleich der Determinante der Informationsmatrix des Gesamtparameters des korrespondierenden varianzanalytischen Modells. Der Vektor der Hilfsvariablen R ist so definiert, daß der in $I_{\beta_1}(d)$ auftretende Korrekturterm $-R_{ij}R_{kl}/N$ gleichhäufig die Werte $-\frac{1}{N}$ bzw. $+\frac{1}{N}$ annimmt.

(b) ergibt sich aus der D_{β_1}-Optimalität von $N_k^*(i_k) = N/I_k (k=1,2)$ in varianzanalytischen Modellen für $N_{12} \in \Delta(N)$.

(c) Sei $N_{12} = N_{12}(\text{prop.})$. Damit N_{12} ganzzahlige Beobachtungshäufigkeiten enthält, muß notwendig eine Zerlegung von N existieren der Art, daß aus

i) $N = a \cdot b$ bei gegebenen Randsummen 1.Ordnung, folgt

ii) $\exists\ c_1(i_1),\ c_2(i_2) \in \mathbb{N}$ derart

$$N_1(i_1) = a \cdot c_1(i_1) \qquad i_1 = 1,\ldots,I_1$$
$$N_2(i_2) = b \cdot c_2(i_2) \qquad i_2 = 1,\ldots,I_2$$

Die Verteilung der Beobachtungspunkte für den ersten Regressionsterm, d.h. $S_{12}^{(1)}$, wird mit dem Ziel durchgeführt, die Matrix $A_1 A_2^T$ komponentenweise zu minimieren. Dieses wird erreicht durch $S_{12}^{*(1)}$, wie angegeben im Satz, da diejenigen Komponenten von $A_1 A_2^T$, die von $S_{12}^{(1)}$ abhängen, für alle gradzahligen Werte von $c_1(i_1)c_2(i_2)$ verschwinden und nur für die (i_1,i_2) von 0 verschieden sind , für welche $c_1(i_1)=c_2(i_2)=1 \bmod 2$ gilt. Dort erreichen wir, daß die Werte dem Betrag nach gleich 1 sind. Wie schon in Beweis Teil (b) verteilen wir die positiven und negativen Werte gleichmäßig:

$$R=R(N_{12},S_{12}^{(1)},l=1,2) = \begin{pmatrix} (R_{2i_1}^{(1)})_{i_1} & (R_{2i_2}^{(1)})_{i_2} \\ (R_{1i_1}^{(2)})_{i_1} & (R_{2i_2}^{(2)})_{i_2} \end{pmatrix} := A_2 A_1^T$$

mit

$$R_{ki_k}^{(1)} = \begin{cases} -1 & i_k \in I_k' \\ +1 & i_k \in I_k'' \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \qquad R_{ki_k}^{(2)} = \begin{cases} -1 & i_k \in J_k' \\ +1 & i_k \in J_k'' \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Da zusätzlich noch $\sum_{i_1=1}^{I_1} \sum_{i_2=1}^{I_2} \sum_{j=1} s_j^{(1)}(i_1,i_2) s_j^{(2)}(i_1,i_2)$ minimale Werte annehmen soll, ist $S_{12}^{*(2)}$ "orthogonal" zu S_{12} definiert worden.

(d) folgt bereits aus Beweis Teil (c), (a).

§ 3.3. Optimale Versuchspläne für β_1 in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,\{-1,+1\})$ und $\bar{\Delta}(N,\{-1,+1\})$

Für Fragestellungen, wie sie in § 2.4. diskutiert sind, wird unter Fallenlassen der Ganzzahligkeitsforderung das Versuchsplanungsproblem für β_1 bei nur von $t_1 \in T_1$ abhängigen Kovariaten behandelt. Als zugrundeliegendes Kriterium verwenden wir D-Optimalität, da wie das folgende Beispiel mit $I_1 = I_2 = 2$ zeigt, G_{β_1}-optimale Versuchspläne i.a. nicht existieren.

Sei $R_{11} = R_{11}(N_{12}) = 2\,N(1,1) - N_1(1)$

$R_{21} = R_{21}(N_{12}) = 2\,N(1,1) - N_2(1)$

$R_{22} = R_{22}(N_{12}) = N_2(2) - 2\,N(1,2)$

dann ist die Informationsmatrix für β_1 in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,\{-1,+1\})$ gegeben durch:

$$I_{\beta_1}(N_{12},S_{12}) = \begin{pmatrix} N_1(1)-\frac{R^2}{N} & N(1,1)-\frac{R}{N}11\frac{R}{N}21 & N(1,2)-\frac{R}{N}11\frac{R}{N}22 \\ N(1,1)-\frac{R}{N}11\frac{R}{N}21 & N_2(1)-\frac{R^2}{N}21 & -\frac{R}{N}21\frac{R}{N}22 \\ N(1,2)-\frac{R}{N}11\frac{R}{N}22 & -\frac{R}{N}21\frac{R}{N}22 & N_2(2)-\frac{R^2}{N}22 \end{pmatrix}$$

Der Lagrangeansatz

$$L(d,\lambda,a) = a^T I_{\beta_1}(d)a + \sum_{i_1=1}^{I_1} \lambda_{i_1}^{(1,2)} \sum_{i_2=1}^{I_2} (N(i_1,i_2) - N_1(i_1)) + \sum_{i_2=1}^{I_2} \lambda_{i_2}^{(2,1)} \sum_{i_1=1}^{I_1} (N(i_1,i_2) - N_2(i_2))$$

liefert nach Eliminierung der Lagrangefaktoren

$$\forall\, a^T \in R^3:\ a^T \begin{pmatrix} -\frac{4}{N} R_{11} & * & * \\ 1-2\frac{R}{N}11\frac{+R}{N}21- & -\frac{4}{N} R_{21} & * \\ -1-2\frac{R}{N}11\frac{+R}{N}22 & -2\frac{R}{N}21\frac{+R}{N}22 & \frac{4}{N} R_{22} \end{pmatrix} a = 0$$

Betrachten wir die Diagonale, so folgt

$$N^*(1,1) = N_1(1)/2 = N_2(1)/2 \quad N^*(1,2) \neq N_2(2)/2$$

⇒ Notwendige Bedingung für die Existenz von N^*_{12} in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,\{-1,+1\})$ ist die Gleichheit aller Randsummen 1.Ordnung. Daher werden wir im folgenden das schwächere Kriterium D-Optimalität verwenden.

Wir gehen hier vor wie in § 2.4., indem wir den Fall I_1,I_2 beliebig auf $I_1 = I_2 = 2$ reduzieren werden, Zum Beweis benötigen wir einige Lemmata, die nachgestellt werden. Zunächst einige Definitionen:

$$\text{Zu } A = \{i_1,i_2,\ldots,i_a\} \subset N_{I_1} \qquad A \neq \emptyset$$
$$B = \{j_1,j_2,\ldots,j_b\} \subset N_{I_2} \qquad B \neq \emptyset$$

führen wir Hilfsvariable ein

$$R_{1i_1} = R_{1i_1}(N_{12}) = 2 \sum_{k\in B} N(i_1,k) - N_1(i_1) \qquad i_1 \in A$$

$$R_{1i_1} = R_{1i_1}(N_{12}) = N_1(i_1) - 2 \sum_{k\in B} N(i_1,k) \qquad i_1 \in A^C$$

$$R_{2i_2} = R_{2i_2}(N_{12}) = 2 \sum_{k\in A} N(k,i_2) - N_2(i_2) \qquad i_2 \in B$$

$$R_{2i_2} = R_{2i_2}(N_{12}) = N_2(i_2) - 2 \sum_{k\in A} N(k,i_2) \qquad i_2 \in B^C$$

Die in § 3.2. unter II.4. angegebene Darstellung der Informationsmatrix mit obigem (R_{1i},R_{2j}), das in Abhängigkeit von A und B für alle N_{12} definiert ist, stellt sich hier dar als

$$I_{\beta_1}(d) = I_{\beta_1}(N_{12},S_{12}) =$$

$$\begin{pmatrix} ((N_1(i)\delta_{ij}-R_{1i}R_{1j}/N)_{1\le i\le I_1-1}^{1\le j\le I_1-1})((N(i,j)-R_{1i}R_{2j}/N)_{1\le i\le I_1-1}^{1\le j\le I_2}) \\ ((N(i,j)-R_{1j}R_{2i}/N)_{1\le i\le I_2}^{1\le j\le I_1-1})((N_2(i)\delta_{ij}-R_{2i}R_{2j}/N)_{1\le i\le I_2}^{1\le j\le I_2}) \end{pmatrix}$$

Bemerkung: $R = R(N_{12},S_{12}) = R(N_{12},S_{12}(A,B))$ mit

$$S_{12} = S_{12}(A,B) \ni s(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & (i_1,i_2) \in A\times B \vee A^C\times B^C \\ -1 & (i_1,i_2) \in A\times B^C \vee A^C\times B \end{cases}$$

Wir werden für jede Zerlegung (A,B) die Informationsmatrix über $N_{12} \in \bar{\Delta}(N_1,N_2)$ optimieren. In einem späteren Lemma bestimmen wir das optimale Paar (A^*,B^*).

Wir beweisen zunächst, daß sich mit Hilfe des Determinantenkriteriums im Falle von $I_1 = I_2 = 2$ optimale Versuchspläne für β_1 angeben lassen.

Satz 3.3.1: In Kovarianzmodellen mit $K_1 = 2$, $K_2 = 1$ und linearer Regression sind D_{β_1}-optimale Versuchspläne $d^* = (N_{12}^*,S_{12}^*)$ in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,\{-1,+1\})$ charakterisiert durch

(i) N_{12}^* eindeutig bestimmt durch $N^*(1,1)$, positive Nullstelle des Polynoms $P(x)$.

$$P(x) = x(N_1(1) - x)\,(2N_2(1) - 2x - N_1(2)) - (N_2(1) - x)\,(N_1(2) - N_2(1) + x)\,(2x - N_1(1))$$

ii) $S_{12}^* = \{s^*(1,1) = -s^*(1,2) = -s^*(2,1) = s^*(2,2) = 1\}$

Beweis:

$$(R_{11},R_{21},R_{22})^T := A_1A_2^T =$$

$$\left(\sum_{i=1}^{2} s(1,i)N(1,i), \sum_{i=1}^{2} s(i,1)N(i,1), \sum_{i=1}^{2} s(i,2)N(i,2)\right)^T$$

wird für alle N_{12} komponentenweise minimiert durch S_{12}^*

$(R^*_{11},R^*_{21},R^*_{22}) = (N(1,1)-N(1,2),N(1,1)-N(2,1),N(2,2)-N(1,2))$

Da in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,\{-1,+1\})$ die Matrix $A_2A_2^T = N$ ist, bleibt die Maximierung von

$$\det(A_1A_1^T - (R^*_{11},R^*_{21},R^*_{22})^T(R^*_{11},R^*_{21},R^*_{22})/N)$$

über N_{12}. Die Auswertung der Determinante liefert:

$$\det I_{\beta_1}(N_{12},S^*_{12}) = 16\, N(1,1)N(1,2)N(2,1)N(2,2)/N$$

Der Lagrangeansatz mit $\det I_{\beta_1}(d)$ an Stelle von $a^TI_{\beta_1}(d)a$ (siehe S. 74) führt nach Eliminierung der Lagrangefaktoren auf die Beziehungsgleichung

$$N(1,1)N(1,2)\{N(2,1)-N(2,2)\} = N(2,1)N(2,2)\{N(1,1)-N(1,2)\}$$

Die linearen Beziehungen unter den $N(i,j)$, $i,j=1,2$ nutzen wir aus und erhalten das Polynom P in der Variablen $x = N(1,1)$ vom Grade 3.

Satz 3.3.2: In $\bar{\Delta}(N_1,N_2,\{-1,+1\})$ existiert eine Menge von D_{β_1}-optimalen Versuchsplänen $d^* = (N^*_{12},S^*_{12})$ bei vorausgesetzter linearer Regression, die charakterisiert sind durch

(i) $S^*_{12} = S^*_{12}(A,B)$

$$s^*(i_1,i_2) = \begin{cases} +1 & (i_1,i_2) \in A \times B \vee A^C \times B^C \\ -1 & (i_1,i_2) \in A \times B^C \vee A^C \times B \end{cases}$$

wobei A,B gegeben sind als

$$\left| \frac{N}{2} - \sum_{k\in A} N_1(k) \right| = \min_{A'\subset\{1,\ldots,I_1\}} \left| \frac{N}{2} - \sum_{k\in A'} N_1(k) \right|$$

$$\left| \frac{N}{2} - \sum_{k\in B} N_2(k) \right| = \min_{B'\subset\{1,\ldots,I_2\}} \left| \frac{N}{2} - \sum_{k\in B'} N_2(k) \right|$$

(ii) N_{12}^* $I_1 \times I_2$ Matrix mit den Komponenten

$$N^*(i_1,i_2) = \begin{cases} \dfrac{N_1(i_1)N_2(i_2)M^*(1,1)}{\sum_A N_1(j_1) \sum_B N_2(j_2)} & (i_1,i_2)\in A\times B \\ \dfrac{N_1(i_1)N_2(i_2)M^*(2,1)}{\sum_{A^C} N_1(j_1) \sum_B N_2(j_2)} & (i_1,i_2)\in A^C\times B \\ \dfrac{N_1(i_1)N_2(i_2)M^*(1,2)}{\sum_A N_1(j_1) \sum_{B^C} N_2(j_2)} & (i_1,i_2)\in A\times B^C \\ \dfrac{N_1(i_1)N_2(i_2)M^*(2,2)}{\sum_{A^C} N_1(j_1) \sum_{B^C} N_2(j_2)} & (i_1,i_2)\in A^C\times B^C \end{cases}$$

Die 2×2 Matrix M* ist die Lösung des Versuchsplanungsproblems in $\bar{\Delta}(M_1,M_2,\{-1,+1\})$ mit $I_1 = I_2 = 2$ und den Randsummen 1.Ordnung

$$M_1(1) = \sum_A N_1(i_1),\ M_2(1) = \sum_B N_2(i_2)$$

die in Satz 3.3.1 angegeben ist.

Bemerkung:

1. Der Satz 3.3.2. liefert eine hinreichende Bedingung für D_{β_1}-Optimalität in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,\{-1,+1\})$. Die Lösung des Optimie-

rungsproblems zeigt, daß eine spezielle Proportionalität der Beobachtungshäufigkeiten gefordert wird:

$$N^*(i_1,i_2) = c(i_1,i_2)\ \frac{N_1(i_1)N_2(i_2)}{N} \qquad i_k=1,\ldots,I_k,\ k=1,2$$

wobei $c(i_1,i_2)$ = const. für $(i_1i_2) \in C \times D$, $C \in \{A,A^c\}$ $D \in \{B,B^c\}$. d^* ist stationärer Punkt von $\det I_{\beta_1}(d)$ in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,\{-1,+1\})$.

2. Zur Bestimmung der Zerlegungen A und B vergleiche Bemerkung zu Satz 2.2.4.

3. Beispiel für die Existenz eines ganzzahligen Versuchsplans, der besser als der proportionale ist.

Sei $N = 120$

$N_1 = (90,15,15)$ $N_2 = (80,16,16,8)$

$$N_{12}^p = \begin{pmatrix} 60 & 12 & 12 & 6 \\ 10 & 2 & 2 & 1 \\ 10 & 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$ proportionaler Versuchsplan

$$N_{12}^{*g} = \begin{pmatrix} 63 & 11 & 11 & 5 \\ 8 & 3 & 3 & 1 \\ 9 & 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$ ganzzahliger D_{β_1}-optimaler Versuchsplan

$$\det I_{\beta_1}(N_{12}^p, S_{12}(N_{12}^p)) = 1.8432 \cdot 10^7$$

$$\det I_{\beta_1}(N_{12}^*, S_{12}(N_{12}^*)) = 1.9236 \cdot 10^7$$

$$\det I_{\beta_1}(N_{12}^{*g}, S_{12}(N_{12}^{*g})) = 1.8954 \cdot 10^7$$

4. Wie bereits in § 2 gibt es für Versuchspläne in Δ und $\bar{\Delta}$ eine Angleichung der Werte der Determinanten der Informationsmatrizen, falls gilt: $N_k(i_k) \leq N/2$ $i_k=1,\ldots,I_k$ (k=1 oder 2)

und I_k groß (impliziert die Existenz einer Zerlegung von N_{I_k} mit $N_k(i) - N/2$ klein):

Sei $N_1 = (45, 15, 45, 15)$ $N_2 = (40, 24, 40, 16)$

Aus Folgerung 3.3.6. erkennen wir, daß die Bedingung für die Übereinstimmung von $N_{12}(\text{prop})$ und $N_{12}^*=N_{12}$ (D_{β_1}-optimal) erfüllt ist:

$$I_{\beta_1}(N_{12}(\text{prop.})) = I_{\beta_1}(N_{12}^*) = 2.3224\cdot 10^9$$

In Δ ist der Vergleichswert mit $K_2=1$ nur wenig besser $\det I_{\beta_1}(N_{12},S_{12}) = 2.329\cdot 10^9$. Daher ist es in solchen Situationen vorteilhaft, in $\bar{\Delta}$ statt in Δ mit proportionalen Versuchsplänen zu arbeiten (kostengünstiger, einfacher).

Beweis:

Sei $d = (N_{12},S_{12}(A,B)) \in \bar{\Delta}(N_1,N_2,\{-1,+1\})$ mit

$\emptyset \neq A \subsetneq N_{I_1}$, $\emptyset \neq B \subsetneq N_{I_2}$

Wir definieren zu A,B

$$M_1(1) = \sum_A N_1(i_1) \qquad M_1(2) = \sum_{A^C} N_1(i_1)$$

$$M_2(1) = \sum_B N_2(i_2) \qquad M_2(2) = \sum_{B^C} N_2(i_2)$$

Seien $\tilde{I}_{\beta_1}(M_{12},\tilde{S}_{12})$ die in Lemma 3.3.3. angegebene 3×3-Matrix, die sich als Informationsmatrix mit $I_1 = I_2 = 2$ und den Randsummen M_1,M_2 auffassen läßt, und $C_i(N_{12},S_{12})$, i=1,...,4 die nach Zeilen- und Spaltenumformungen in Lemma

3.3.3. auftretenden Hauptuntermatrizen.

Der für das gegebene Problem adäquate Lagrangeansatz

$$L(d,\lambda) = \det I_{\beta_1}(d) + \sum_{i_1=1}^{I_1} \lambda_{i_1}^{(1,2)} \left(\sum_{i_2=1}^{I_2} N(i_1,i_2) - N_1(i_1) \right) + \sum_{i_2=1}^{I_1} \lambda_{i_2}^{(2,1)} \left(\sum_{i_1=1}^{I_1} N(i_1,i_2) - N_2(i_2) \right)$$

führt nach Eliminierung der Lagrangefaktoren auf das Gleichungssystem (3.2):

$$\{ \Delta_{ijkl} \det(I_{\beta_1}(N_{12},S_{12})) = 0, \quad i,j=1,..,I_1, \; k,l=1,..,I_2 \}$$

mit dem Differenzialoperator

$$\Delta_{ijkl} := (\partial/\partial N(i,k) - \partial/\partial N(i,l) - \partial/\partial N(j,k) - \partial/\partial N(j,l))$$

Die Berechnung der Determinante von $I_{\beta_1}(N_{12},S_{12})$ mit Hilfe des Laplaceschen Entwicklungssatz , wir entwickeln nach den ersten drei Zeilen und setzen die Matrixoperationen von Lemma 3.3.3. voraus, liefert:

$$\det I_{\beta_1}(N_{12},S_{12}) = \det I_{\tilde{\beta}_1}(M_{12},S_{12}) \prod_{i=1}^{4} \det C_i(N_{12},S_{12}) + \sum_{\substack{(i,j,k) \\ \neq (1,2,3)}} \operatorname{sgn}(i,j,k,l_1,..,l_{I_1+I_2-1}) \det B_{ijk} \det C_{ijk}$$

Die Matrizen $B_{ijk}(N_{12},S_{12})$ sind aus den Komponenten (v,i), (v,j), (v,k), $v=1,2,3$ von $I_{\beta_1}(N_{12},S_{12})$ gebildete 3×3 Matrizen. Entsprechend dem Entwicklungssatz ergeben sich zu B_{ijk} die $(I_1+I_2-4)\times(I_1+I_2-4)$ Matrizen C_{ijk}. Falls f die Anzahl der Inversionen von $(v_1,v_2,\ldots,v_k)$ ist, so gilt

$$\operatorname{sgn}(v_1,\ldots,v_k) = (-1)^f$$

Die im Beweis von Lemma 3.3.3. ausgeführten Matrizenopera-

tionen ermöglichen es uns, die zur Bestimmung von B_{ijk} notwendigen Zeilen von $\bar{I}_{\beta_1}(d)$ anzugeben.

$$(H_1 | H_2 | H_3 | H_4 | H_5)(d) := ((\bar{I}_{\beta_1}(d)(i,j))_{i=1,2,3}^{j=1,..,I_1+I_2-1})$$

$$H_1 = \tilde{I}_{\tilde{\beta}_1}(M_{12},\tilde{S}_{12})$$

$$H_2 = \left(\begin{array}{l} N_1(i) - R_{1i} \sum_A N_1(j) / \sum_A R_{1j} \\ \sum_B N(i,j) - R_{1i} \sum_A \sum_B N(k,j) / \sum_A R_{1k} \\ \sum_{B^C} N(i,j) - R_{1i} \sum_A \sum_{B^C} N(k,j) / \sum_A R_{1k} \end{array}\right) i \in A - \{1\}$$

$$H_3 = \left(\begin{array}{l} 0 \\ \sum_B N(i,j) - R_{1i} \sum_{A^C} \sum_B N(k,j) / \sum_{A^C} R_{1k} \\ \sum_{B^C} N(i,j) - R_{1i} \sum_{A^C} \sum_{B^C} N(k,j) / \sum_{A^C} R_{1k} \end{array}\right) i \in A^C - \{I_1\}$$

$$H_4 = \left(\begin{array}{l} \sum_A N(i,j) - R_{2j} \sum_A \sum_B N(i,k) / \sum_B R_{2k} \\ N_2(j) - R_{2j} \sum_B N_2(k) / \sum_B R_{2k} \\ 0 \end{array}\right) j \in B - \{1\}$$

$$H_5 = \left(\begin{array}{l} \sum_A N(k,j) - R_{2j} \sum_A \sum_{B^C} N(i,k) / \sum_{B^C} R_{2k} \\ 0 \\ N_2(j) - R_{2j} \sum_{B^C} N_2(k) / \sum_{B^C} R_{2i} \end{array}\right) j \in B^C - \{b\}$$

$b := \min\{i \mid i \in B^C\}$

Das Gleichungssystem (3.2) ist äquivalent zu

$$\{ \Delta_{mnpq} \det \tilde{I}_{\tilde{\beta}_1}(M_{12},\tilde{S}_{12}) \prod_{i=1}^{4} \det C_i(N_{12},S_{12}) +$$

$$\det \tilde{I}_{\tilde{\beta}_1}(M_{12},\tilde{S}_{12}) \Delta_{mnpq} \prod_{i=1} \det C_i(N_{12},S_{12}) +$$

$$\sum_{(i,j,k)\neq(1,2,3)} \operatorname{sgn}(i,j,k,..,l)(\Delta_{mnpq} \det B_{ijk} \det C_{ijk} + \det B_{ijk} \Delta_{mnpq} \det C_{ijk})\}$$

$m,n=1,..,I_1,\ p,q=1,..,I_2,\ r:=I_1+I_2-1$

Beh.: Für alle Paare A,B wird das Gleichungssystem (3.2) gelöst durch:

(i) $S_{12} = S_{12}(A,B)$

(ii) M^*_{12} , $\tilde{S}_{12}(A,B)$, die den Bedingungen von Satz 3.3.1 in $\bar{\Delta}(M_1,M_2,\{-1,+1\})$ genügen

(iii) N^*_{12} , dessen Komponenten das System von Beziehungsgleichungen (3.3) löst:

$$\sum_{B} N(i_1,i_2)/N_1(i_1) = \sum_{B} N(j_1,i_2)/N_1(j_1) \qquad i_1,j_1 \in A \vee A^C$$

$$\sum_{B^C} N(i_1,i_2)/N_1(i_1) = \sum_{B^C} N(j_1,i_2)/N_1(j_1) \qquad i_1,j_1 \in A \vee A^C$$

$$\sum_{A} N(i_1,i_2)/N_2(i_2) = \sum_{A} N(i_1,j_2)/N_2(j_2) \qquad i_2,j_2 \in B \vee B^C$$

$$\sum_{A^C} N(i_1,i_2)/N_2(i_2) = \sum_{A^C} N(i_1,j_2)/N_2(j_2) \qquad i_2,j_2 \in B \vee B^C$$

Beweis: Die unter (3.3) aufgelisteten Bedingungen an N_{12} bewirken, daß die Determinante der Matrix B_{ijk},$(i,j,k) \neq (1,2,3)$ Null wird, da B_{ijk} mindestens eine Spalte der Matrizen H_i $(i=2,..,5)$ enthält und diese unter (3.3)(iii) zu Nullmatrizen werden, wie die Folge von Äquivalenzen zeigt (oBdA verwenden wir die die Gleichungen von (iii)(1)):

$$\Leftrightarrow \quad \sum_{B} N(i_1,i_2)/N_1(i_1) = \sum_{B} N(j_1,i_2)/N_1(j_1) \qquad i_1,j_1 \in A \vee A^C$$

$$\Leftrightarrow \quad N_1(j_1) \sum_{B} N(i_1,i_2) = N_1(i_1) \sum_{B} N(j_1,i_2) \qquad i_1,j_1 \in A \vee A^C$$

$\Leftrightarrow$ Nach Summation über $i_1 \in A$ (bzw. $i \in A^C$)

$$N_1(j_1) \sum_{A} \sum_{B} N(i_1,i_2) = \sum_{A} N_1(i_1) \sum_{B} N(j_1,i_2) \qquad j_1 \in A \vee A^C$$

(vgl. Definition von R_{1i})

$$\Leftrightarrow \quad \sum_{A} R_{1i_1} \sum_{B} N(j_1,i_2) = R_{1j_1} \sum_{A} \sum_{B} N(i_1,i_2) \qquad j \in A \vee A^C$$

Damit reduziert sich das in Gleichung (3.2) zu lösende System auf Gleichungen der Form

$$\Delta_{mnpq} \det \tilde{I}_{\tilde{\beta}_1}(M_{12},\tilde{S}_{12}) \prod_{i=1}^{4} \det C_i(N_{12},S_{12}) +$$
$$+ \det \tilde{I}_{\tilde{\beta}_1}(M_{12},\tilde{S}_{12}) \Delta_{mnpq} \prod_{i=1}^{4} \det C_i(N_{12},S_{12}) = 0$$

$m,n=1,\ldots,I_1,\ p,q=1,\ldots,I_2$

Da die Matrizen C_i die gleiche Struktur besitzen, untersuchen wir oBdA die Ableitungen von det C_1 aus Lemma 3.3.4.:

$$\partial \det C_1 / \partial N(i_1,i_2) =$$
$$= \partial / \partial N(i_1,i_2) \{ \sum_{i\in A} R_{1i}^2 \prod_{\substack{j\neq i \\ j\in A}} N_1(j) / \Big(\sum_{i\in A} R_{1i} \Big)^2 \} =$$

$$= \Big(\sum_{i\in A} R_{1i} \Big)^{-4} \{ 2R_{1i_1} \prod_{\substack{j\in A \\ i\neq j}} N_1(j) \Big(\sum_{i\in A} R_{1i} \Big)^2 \frac{\partial R_{1i_1}}{\partial N(i_1,i_2)} -$$
$$2 \Big(\sum_{i\in A} R_{1i} \Big) \sum_{i\in A} \Big(R_{1i}^2 \prod_{\substack{j\in A \\ i\neq j}} N_1(j) \Big) \frac{\partial R_{1i_1}}{\partial N(i_1,i_2)} \} =$$

$$= \Big(\sum_{i\in A} R_{1i} \Big)^{-2} \{ 4 \sum_{i\in A} \Big(R_{1i} \prod_{\substack{j\in A \\ i\neq j}} N_1(j) (R_{1i} N_1(i_1) - R_{1i_1} N_1(i)) \Big) \}$$

Wegen $R_{1i_1} / \sum_{k\in B} N(i_1,k) = R_{1j_1} / \sum_{k\in B} N(j_1,k)$ für $i_1,j_1 \in A$

und (iii)(3) gilt

$$\partial \det C_1 / \partial N(i_1,i_2) = 0$$

für alle N_{12}, die den unter (iii) aufgelisteten Bedingungen genügen. Auf gleiche Weise beweist man diese Aussage für det C_i (i=2,3,4). Damit ist (3.2) auf das Gleichungssystem vereinfacht:

$$\{ \Delta_{mnpq} \det \tilde{I}_{\tilde{\beta}_1}(M_{12},\tilde{S}_{12}(A,B)) = 0 \quad 1\leq m,n\leq I_1,\ 1\leq p,q\leq I_2 \}$$

Die Lösung dieses Systems ist äquivalent zu $d' = (M_{12}^*, \tilde{S}_{12}^*)$

von dem in Satz 3.3.1. die D_{β_1}-Optimalität in $\bar{\Delta}(M_1,M_2,\{-1,+1\})$ bewiesen wurde.

Für festgewählte A,B können wir (vgl. Satz 3.3.1.) den Wert der Determinante von $I_{\beta_1}(d')$ angeben. Unter Ausnutzung von Lemma 3.3.3. und 3.3.4. ist auch det $C_i(N_{12}^*,S_{12})$ bekannt, so daß wir für die Determinante der Informationsmatrix erhalten

$$\det I_{\beta_1}(N_{12}^*(A,B),S_{12}^*(A,B)) =$$

$$= 16 \prod_{i_1=1}^{I_1} N_1(i_1) \prod_{i_2=1}^{I_2} N_2(i_2) \prod_{i=1}^{2} M^*(1,i) \prod_{i=1}^{2} M^*(2,i) / \{N \prod_{i=1}^{2} M_1(i) \prod_{i=1}^{2} M_2(i)\}$$

Um den Beweis zu komplettieren, müssen wir noch das optimale Paar (A,B) bestimmen. D.h.: gesucht ist $(A,B) \in \mathbb{N}_{I_1} \times \mathbb{N}_{I_2}$ derart, daß

$F(A,B) = \frac{M^*(1,1)M^*(1,2)M^*(2,1)M^*(2,2)}{M_1(1)\ M_1(2)\ M_2(1)\ M_2(2)}$ maximal wird. Sei

$$\tilde{F}(A,B)(x) := x(M_1(1)-x)(M_2(1)-x)(x-M_2(1)+M_1(2))/\prod_{i}^{2} M_1(i) \prod_{i}^{2} M_2(i)$$

dann folgt für $\tilde{F}(A,B)(x) := f_{\varepsilon\delta}(x)$ mit

A ∋: $\sum_A N_1(i) = M_1(1) - \varepsilon$

B ∋: $\sum_B N_2(i) = M_2(1) - \delta$

aus Lemma 3.3.5., daß ein nichtleeres Intervall $U=U(A,A^*,B,B^*)$ existiert mit $\tilde{F}(A,B)(x) \leq \tilde{F}(A^*,B^*)(x) \quad x \in U(A,A^*,B,B^*)$

$F(A,B) \leq F(A^*,B^*)$

Dabei sind A^* und B^* gerade die Zerlegungen von $\mathbb{N}_{I_1}$ und $\mathbb{N}_{I_2}$, die $|\sum_A N_1(i) - N/2|$ bzw. $|\sum_B N(i) - N/2|$ minimieren.

Lemma 3.3.3.: Für die Informationsmatrix $I_{\beta_1}(N_{12},S_{12}(A,B))$ eines Kovarianzmodells mit $K_1 = 2$, $K_2 = 1$ gibt es unter der Voraussetzung (3.3)(iii) die Darstellung

$$I_{\beta_1}(N_{12},S_{12}(A,B)) \hat{=} \begin{pmatrix} \tilde{I}_{\tilde{\beta}_1}(M_{12},\tilde{S}_{12}) & 0 \\ 0 & \operatorname{diag}(C_i(N_{12},S_{12}),i=1,..,4) \end{pmatrix}$$

wobei

(i) $M_{12} = \{M(i,j): i,j=1,2\}$ die Randsummen 1. Ordnung

$M_1(1) = \sum_A N_1(i)$ $\quad M_1(2) = N - M_1(1)$

$M_2(1) = \sum_B N_2(i)$ $\quad M_2(2) = N - M_2(1)$

habe und $M(1,1) = \sum_A \sum_B N(i_1,i_2)$

$\tilde{S}_{12} = \{ \tilde{s}(1,1) = -\tilde{s}(1,2) = -\tilde{s}(2,1) = \tilde{s}(2,2) \}$

(ii) $C_l(N_{12},S_{12}) = C_l(N_{12},S_{12}(A,B)) = ((c_{ij}^{(l)})_{i,j=1,\ldots,a_l})$

$l=1,\ldots,4$

$$c_{ij}^{(1)}(A) = N_1(i)\delta_{ij} - (N_1(i)R_{1j}+N_1(j)R_{1i})/(\sum_A R_{1k}) + R_{1i}R_{1j}\sum_A N_1(k)/(\sum_A R_{1k})^2$$

$c_{ij}^{(2)} = c_{ij}^{(1)}(A^C)$

$$c_{ij}^{(3)}(B) = N_2(i)\delta_{ij} - (N_2(i)R_{2j}+N_2(j)R_{2i})/(\sum_B R_{2k}) + R_{2i}R_{2j}\sum_B N_2(k)/(\sum_B R_{2k})^2$$

$c_{ij}^{(4)} = c_{ij}^{(3)}(B^C)$

mit $A=\{i_1,\ldots,i_a\}$, $B=\{j_1,\ldots,j_b\}$ ergeben sich dabei

$a_1=a-1$, $a_2=I_1-a-1$, $a_3=b-1$, $a_4=I_2-b-1$

Beweis:

Wir ergänzen die Informationsmatrix $I_{\beta_1}(d)$ durch die aus Normierungsgründen gestrichene I_1-ste Zeile und Spalte, nämlich

$$((-R_{1I_1}R_{1i}/N)_{1\le i\le I_1-1}), N_1(I_1)-R_{1I_1}^2/N, ((N(I_1,i)-R_{1I_1}R_{2i}/N)_{1\le i\le I_2})$$

zur $(I_1+I_2)\times(I_1+I_2)$ Matrix $\bar{I}_{\beta_1}(N_{12},S_{12})$. Auf diese Matrix werden lineare Transformationen angewandt, die nach Streichung der I_1-sten Zeile und Spalte eine zu $I_{\beta_1}(N_{12},S_{12})$ äquivalente Matrix liefern. Die in (3.3)(iii) aufgeführten Bedingungsgleichungen haben das Verschwinden der Nebendiagonalmatrizen zur Folge. Wir geben jeweils die einzelnen Transformationen ohne die explizite Darstellung von $\bar{I}_{\beta_1}(d)$ an.
OBdA sei A = {1,..,a} , B = {1,..,b}

1.1. Addition der 2.,..,a-ten Zeile zur 1-sten Zeile

1.2. Addition der a+1.,..,I_1-1 sten Zeile zur I_1 sten

1.3. Addition der I_1+2.,..,I_1+b ten Zeile zur I_1+1 sten

1.4. Addition der I_1+b+2.,..,I_1+I_2 ten Zeile zur I_1+b+1 sten

2.1.-2.4. Gleiche Operationen für die Spalten

3.1. Addition des $-R_{1j}/\sum_{A} R_{1k}$ -fachen der 1. Zeile zur j-ten Zeile $(j=2,\ldots,a)$

3.2. Addition des $-R_{1j}/\sum_{A^c} R_{1k}$ -fachen der I_1. Zeile zur j-ten Zeile $(j=a+1,\ldots,I_1-1)$

3.3. Addition des $-R_{2j}/\sum_{B} R_{2k}$ -fachen der I_1+1. Zeile zur j-ten Zeile $(j=I_1+2,\ldots,I_1+b)$

3.4. Addition des $-R_{2j}/\sum_{B^c} R_{2k}$ -fachen der I_1+b+1. Zeile zur j-ten Zeile $(j=I_1+b+2,\ldots,I_1+I_2)$

4.1.-4.4. Gleiche Operationen für die Spalten mit entsprechenden Werten um Symmetrie sicher zu stellen.

Wir vertauschen noch die j-te Zeile mit der j-1 sten Zeile $(j=I_1+1,\ldots,3)$, sowie die j-te Zeile $(j=I_1+b+1,\ldots,4)$ mit der j-1 sten. Die gleichen Vertauschungen nehmen wir für die

Spalten vor. Hierauf werden die oben genannten Streichungen durchgeführt.

Im folgenden Lemma berechnen wir die Determinanten der in der Hauptdiagonalen von $I_{\beta_1}(d)$ aus dem voranstehenden Lemma auftretenden Matrizen $C_i, i=1,..,4$.

Lemma 3.3.4.: Sei C eine $(I-1)\times(I-1)$ Matrix mit den Komponenten

$$c_{ij} = N_1(i)\delta_{ij} - (N_1(i)R_{1j} + N_1(j)R_{1i})/\sum_{k=1}^{I} R_{1k} + R_{1i}R_{1j}\sum_{k=1}^{I} N_1(k)/(\sum_{k=1}^{I} R_{1k})^2 \qquad i,j=2,\ldots,I$$

$-\infty < c_{ij} < \infty$. Dann gilt, falls $\sum_{i=1}^{I} R_{1i} \neq 0$:

$$\det C = (\sum_{i=1}^{I} R_{1i})^{-2}(\sum_{i=1}^{I} R_{1i}^2 \prod_{\substack{k=1 \\ k\neq i}}^{I} N_1(k))$$

Beweis:

Wir bringen C auf Dreiecksgestalt:

1. Addition der 2.,..,I-1 sten Spalte zur 1sten Spalte
2. Addition des R_{1i+1}/R_{11} -fachen der 1sten Spalte zur i-ten Spalte (i=2,...,I-1)
3. Addition des R_{1i+1}/R_{12} -fachen der 1sten Zeile zur i-ten Zeile (i=2,...,I-1)
4. Addition des $R_{12}/R_{11} \cdot (R_{11}N_1(i)-R_{1i}N_1(1))/(N_1(i)\sum_{k=1}^{I} R_{1k})$-fachen der (i-1)sten Zeile zur 1sten Zeile (i=2,..,I-1)

Damit ist erreicht

$$C = \begin{pmatrix} (\sum_{k=1}^{I} R_{1k})^{-2} R_{11}N_1(2)+R_{12}N_1(1)+N_1(1)N_2(2)\sum_{k=3}^{I} \frac{R_{1k}}{N_1(k)} & * \\ 0 & \operatorname{diag}(N_1(3),..,N_1(I)) \end{pmatrix}$$

Lemma 3.3.5.: Sei $0 \le \varepsilon \le \delta < N/2$, $0 \le \delta' \le \delta$. Ferner sei

$$f_{\varepsilon\delta}(x) = f_{1\varepsilon}(x) \cdot f_{2\varepsilon\delta}(x) \text{ mit}$$

$$f_{1\varepsilon}(x) = x(N/2-\varepsilon-x)/((N/2)^2-\varepsilon^2)$$

$$f_{2\varepsilon\delta}(x) = (x-\delta+\varepsilon)(N/2+\delta-x)/((N/2)^2-\delta^2)$$

Dann existiert eine Umgebung $U_{\varepsilon\delta}(x)$ mit

$$f_{\varepsilon\delta}(x) \le f_{\varepsilon\delta'}(x) \qquad \text{für alle } \delta' \le \delta$$

Insbesondere gilt

$$\max_x f_{\varepsilon\delta}(x) \le \max_x f_{\varepsilon\delta'}(x)$$

Beweis:

Seien $\varepsilon, \delta, \delta'$ gegeben. Wir finden $x_i(\varepsilon,\delta,\delta')$ $(i=1,..,3)$ für die wir beweisen

$$f_{\varepsilon\delta}(x_i(\varepsilon,\delta,\delta')) \le f_{\varepsilon\delta}(x_i(\varepsilon,\delta,\delta')) \qquad i=1,..,3$$

Unter Ausnutzung der Konkavität von $f_{1\varepsilon}, f_{2\varepsilon\delta}$ definieren wir dann

$$U_{\varepsilon\delta}(x) := (x_1(\varepsilon,\delta,\delta'), x_3(\varepsilon,\delta,\delta')) = (x_1(\varepsilon,\delta), x_3(\varepsilon,\delta))$$

Für $x_1 = x_1(\varepsilon,\delta,\delta') = N/4-\varepsilon/2$ ist

$$f_{\varepsilon\delta}(x_1)-f_{\varepsilon\delta'}(x_1) = f_{1\varepsilon}(x_1)(f_{2\varepsilon\delta}(x_1)-f_{2\varepsilon\delta'}(x_1)) =$$

$$f_{1\varepsilon}(x_1)\{((N/4+\varepsilon/2)^2-\delta^2)/((N/2)^2-\delta^2) - ((N/4+\varepsilon/2)^2-\delta'^2)/((N/2)^2-\delta'^2)\}$$

$$f_{1\varepsilon}(x_1)\{(\delta^2-\delta'^2)((N/4+\varepsilon/2)^2-(N/2)^2)/\{((N/2)^2-\delta^2)((N/2)^2-\delta'^2)\}\} \le 0$$

für $\varepsilon < N/2$, $\delta' \le \delta$

Für $x_2 = x_2(\varepsilon,\delta,\delta') = (N/2-\varepsilon)(N/2+\delta')/N$ gilt

$$f_{\varepsilon\delta}(x_2) = f_{1\varepsilon}(x_2)\{(N/2)^2(N/2+\varepsilon)^2-(\delta N-\delta'(N/2-\varepsilon))^2/((N/2)^2-\delta'^2)$$

Für $x_3 = x_3(\varepsilon,\delta,\delta') = (N/2-\varepsilon)(N/2+\delta)$ finden wir die gleiche Darstellung von $f_{\varepsilon\delta}$ wie mit x_2 mit δ statt δ'.

$$f_{2\varepsilon\delta}(x_2) = \{(N/2)^2(N/2+\varepsilon)^2-(\delta N-\delta'(N/2-\varepsilon))^2/(N^2((N/2)^2-\delta'^2))$$

$$\le (N/2+\varepsilon)^2/N^2 = f_{2\varepsilon\delta'}(x_2)$$

wegen $\delta^2(N/2+\varepsilon)^2 = (\delta(N/2+\varepsilon)+\gamma(N/2-\varepsilon))^2$, $\delta = \delta' + \gamma, \gamma \ge 0$

$$f_{2\varepsilon\delta}(x_3) = (N/2+\varepsilon)^2/N^2 \leq$$
$$\leq f_{2\varepsilon\delta'}(x_3) = \{(N/2)^2(N/2+\varepsilon)^2-(\delta'N-\delta(N/2-\varepsilon))^2\}/(N^2((N/2)^2-\delta'^2))$$

Diese Ungleichung besteht wegen

$$\delta'^2(N/2+\varepsilon)^2 \geq (\delta'(N/2+\varepsilon)-\gamma(N/2-\varepsilon))^2$$

Wir benötigen noch die Ableitung von $f_{\varepsilon\delta}$ in x_i (i=1,2,3)

$$f'_{\varepsilon\delta}(x_1) = f_{1\varepsilon}(x_1)f'_{2\varepsilon\delta}(x_1) = 2\delta/((N/2)^2-\delta^2) > 0 \qquad \forall\delta > 0$$
$$f'_{\varepsilon\delta}(x_2) = -2\varepsilon\delta'/N^2$$
$$f'_{\varepsilon\delta}(x_3) = -2\varepsilon\delta/N^2$$

Daraus entnehmen wir, daß

$$x^*(\varepsilon,\delta),\ x^*(\varepsilon,\delta') \in U_{\varepsilon\delta} := (x_1(\varepsilon,\delta), x_3(\varepsilon,\delta))$$

wobei $f_{\varepsilon\delta}(x^*(\varepsilon,\delta)) = \max_x f_{\varepsilon\delta}(x)$

Da $f_{2\varepsilon\delta}$ und $f_{2\varepsilon\delta'}$ Parabeln sind, erfüllen sie

$f_{2\varepsilon\delta}(x_i) \leq f_{2\varepsilon\delta'}(x_i)$ (i=1,2,3) und da die Maxima von $f_{\varepsilon\delta}$ in $U_{\varepsilon\delta}$ liegen ist das Lemma bewiesen.

Bemerkung:

Das Lemma 3.3.4. gilt ebenfalls, wenn wir die Indizes vertauschen:

$$f_{1\delta}(x) = x(N/2+\delta-x)/((N/2)^2-\delta^2)$$
$$f_{2\varepsilon\delta}(x) = (N/2-\varepsilon-x)(x-\varepsilon+\delta)/((N/2)^2-\varepsilon^2)$$

liefern ein $U_{\varepsilon\varepsilon'\delta}$ mit

$$\forall\ x \in U_{\varepsilon\varepsilon'\delta}:\ f_{\varepsilon\delta}(x) \leq f_{\varepsilon'\delta}(x)$$

Auf dem Durchschnitt der Umgebungen $U_{\varepsilon\varepsilon'\delta}, U_{\varepsilon\delta'\delta}$ gilt dann:

$$f_{\varepsilon\delta}(x) \leq f_{\varepsilon'\delta'}(x)$$

Folgerung 3.3.6.: Gilt für die Randsummen 1. Ordnung

entweder $\exists\ A \in \mathbb{N}_{I_1} : \sum_{\hat{A}} N_1(i) = N/2$

oder $\exists\ B \in \mathbb{N}_{I_2} \sum_{B} N_2(i) = N/2$

so sind in $\bar{\Delta}(N_1,N_2,\{-1,+1\})$ bei linearer Regression D_{β_1}-optimale Versuchspläne gegeben durch

(i) $N^*(i_1,i_2) = N_1^*(i_1)N_2(i_2)/N \qquad i_k=1,\ldots,I_k,\ k=1,2$

(ii) $S_{12}^* = S_{12}^*(A,B)$

Beweis:

Wir setzen die Proportionalität des Versuchsplans M_{12} voraus. Die Bestimmungsgleichung von Satz 3.3.1. liefert die Äquivalenzen:

$$M(1,1)M(1,2)(M(2,2)-M(2,1))=M(2,1)M(2,2)(M(1,2)-M(1,1))$$

$$M_1^2(1)M_2(1)M_1(2)M_2(2)\{M_2(2)-M_2(1)\}=$$
$$M_1^2(2)M_2(2)M_1(1)M_2(1)\{M_2(2)-M_2(1)\}$$

$$\{M_1(1)-M_1(2)\}\{M_2(1)-M_2(2)\} = 0$$

Bem: Die Folgerung besagt, daß nur dann D_{β_1}-optimale Versuchspläne durch proportionale Beobachtungshäufigkeiten charakterisiert werden, falls man die Kovariaten bei einem der Faktoren jeweils zur Hälfte auf die extremsten Werte ihres Definitionsbereichs legen kann.

Folgerung 3.3.7.: In $\bar{\Delta}(N,\{-1,+1\})$ sind D_{β_1}-optimale Versuchspläne charakterisiert durch

(i) $N^*(i_1,i_2) = N_1^*(i_1)N_2^*(i_2)/N \qquad i_k=1,\ldots,I_k,\ k=1,2$

(ii) $N_1^*(i_1) = N/I_1 \qquad i_1=1,\ldots,I_1$

$N_2^*(i_2) = N/I_2 \qquad i_2=1,\ldots,I_2$

(iii) $S_{12}^* = S_{12}^*(\mathbb{N}_{I_1}/2,\mathbb{N}_{I_2}/2)$

Beweis:

Die Determinante für $I_1 = I_2 = 2$ von $I_{\beta_1}(d)$ wurde im Beweis von Satz 3.3.1. bestimmt. In $\bar{\Delta}(N)$ wird dieser Ausdruck für $N(i,j)=N/4$ maximal, d.h.

(*) $\quad N_1(i) = N_2(i) = N/2 \qquad i=1,2$

Die Hilfsvariablen R_{ki} verschwinden bei vorausgesetzter Proportionalität und wegen der Existenz der Zerlegung (A,B) mit (*) . Daher bleibt lediglich die Optimierung von $A_1 A_1^T$ in $\bar{\Delta}(N)$, die bei Kurotschka [11] durchgeführt ist und das obige Ergebnis liefert.

Schlußbemerkungen

1. Die Bestimmung D_{β_2}-optimaler Versuchspläne in $\Delta(N_1,\ldots,N_{K_1},[-1,+1]^{K_2})$ für $K_1,K_2\geq 1$ ist nicht allgemein für alle Paare (K_1,K_2) exakt zu lösen. Die in § 2. angegebenen Lösungen lassen sich im Falle $K_1>2$, $K_2=1$ mit $N^*_{12\ldots K_1}=N^p_{12\ldots K_1}$ (proportionale) und $S^*_{12\ldots K_1}$, gegeben durch

$$s_j(i_1,\ldots,i_{K_1}) = \begin{cases} +1 & j=1,\ldots,[\prod_{l=1}^{K_1} N_l(i_l)/2N^{K_1-1}] \\ -1 & \text{sonst} \end{cases}$$

übertragen. (Vgl. Beweis für Satz 2.3.2. und Kurotschka [11]) Für $K_2>1$ können asymptotisch D_{β_2}-optimale Versuchspläne jedoch nicht mehr mit den Methoden von § 2. erstellt werden. Allein das dortige Vorgehen scheint auch hier sinnvoll zu sein:

a) Komponentenweise Minimierung von $A_2A_1^T$, was erreicht wird durch die Verteilung der Kovariaten zu $t_1\in T_1$ jeweils zur Hälfte auf die Randpunkte von T_2. Weiter ist für alle $k,l = 1,\ldots,K_2$ der Betrag von

$$\sum_{i_r=1}^{I_r} \sum_j s_j^{(l)}(i_1,\ldots,i_{K_1})s^{(k)}(i_1,\ldots,i_{K_1})$$
$$r=1,..,K_1$$

zu minimieren.

b) $N^p_{12..K_1}$ ist für die Diagonale des Korrekturterms $A_2A_1^T(A_1A_1^T)^{-1}A_1A_2^T$ die optimale Wahl; es läßt sich aber nichts über die Größe der Nebendiagonalelemente aussagen.

2. Die Ergebnisse von § 3. sind wegen des angelegten Determinantenkriteriums für β_1 in $\Delta(N_1,\ldots,N_{K_1},\{-1,+1\}^{K_2})$ und der Größenrelation zwischen det $A_1A_1^T$ und det $I_{\beta_1}(d)$ auch für $K_2>2$ anwendbar, d.h. proportionale Versuchspläne und solche Systeme von Kovariaten $S^{(l)}_{12..K_1}$ $(l=1,\ldots,K_2)$ mit

$$\left|\sum_{i_1=1}^{I_1}\sum_j s_j^{(l)}(i_1,\ldots,i_{K_1})\right|\leq 1 \qquad l=1,\ldots,K_2$$

$$\left|\sum_{i_1=1}^{I_1}\sum_{i_k=1}^{I_k}\sum_j s_j^{(l)}(i_1,\ldots,i_{K_1})\, s_j^{(k)}(i_1,\ldots,i_{K_1})\right|=\min_{k,l=1,\ldots,K_2}$$

sind gute Näherungslösungen für das Versuchsplanungsproblem.

3. Zu $N^*_{12..K_1}$ kann man immer einen ganzzahligen Versuchsplan $N^g_{12\ldots K_1}$ finden mit

$$|N^*(i_1,\ldots,i_{K_1}) - N^g(i_1,\ldots,i_{K_1})|\leq 1$$

(Satz von Ford/Fulkerson, Flows in Network, Princeton Univ. Press 1962)

Literatur

1. BANDEMER,H.: Optimale Versuchsplanung. Akademie-Verlag Berlin 1973
2. COCHRAN,W.C.: Analysis of Covariance: Its nature and uses. Biometrics 13 (1957)
3. COX,D.R.: The use of a concomitant variable in selecting an experimental design. Biometrika 44 (1957)
4. FEDOROV,V.V.: Theory of optimal experiments. Academic Press, N.Y. 1972
5. GRAYBILL,F.A.: Introduction to matrices with application in statistics. Wadsworth Publ.Co., (1969)
6. HARVILLE,D.H.: Computing optimum designs for covariance models. (J.N. Srivastava,ed.), A survey of statistical design and linear models (1975),North Holland Publ.Co.
7. JUNG,W.: G-optimale Versuchsplanung für die Regressionsgerade $y(x) = \theta_1+\theta_2 x$. Biometrische Zeitschrift 13 (1971)
8. KIEFER,J.: Optimum experimental designs. J.Roy.Stat.Soc. Ser.B. 21 (1959)
9. KUROTSCHKA,V.G.: Optimale Versuchspläne bei zweifach klassifizierten Modellen. Metrika 16,17 (1971)
10. ---: Optimale Versuchsplanung bei Modellen der Varianzanalyse (Habil. 1972).
11. ---, P.S.Dwyer: Optimal design of tree way layout without interaction. Math.Op.u.Stat. Bd. 5 (1974)
12. de Lury,D.B.: Analysis of Covariance. Biometrics 4 (1948)
13. RAO,C.R.: Linear statistical inference and its application. Wiley, New York (1965)
14. ROHDE,C.A.: Inverses of partitioned matrices. J.Soc.Ind. Appl.Math. 13 (1965)
15. SCHEFFE,H.: The analysis of variance. Wiley,New York (1959)
16. ZELEN,M.: The analysis of covariance for incomplete block designs. Biometrics 13 (1957)

Lebenslauf

Am 26. Oktober 1947 wurde ich als zweites Kind des Landwirts Theodor Köster und seiner Ehefrau Gerda, geb. Ahlers, in Brake, Kreis Wesermarsch, geboren. Nach dem Besuch der vier Klassen Grundschule wechselte ich 1958 auf das Gymnasium Brake über und legte dort am 6. Juni 1967 die Reifeprüfung ab.
Nach Ableistung meines Wehrdienstes begann ich im Wintersemester 1968/69 an der Georg-August-Universität in Göttingen das Studium der Mathematik. Nach dem Vordiplom im Oktober 1970 beschäftigte ich mich hauptsächlich mit Statistik unter Anleitung von Herrn Prof. Kurotschka. Am 30. April 1974 legte ich die Diplomprüfung in Mathematik ab. Vom Oktober 1974 an erhielt ich zwei Jahre lang ein Stipendium nach dem Graduiertenförderungsgesetz. Im Rahmen dieses Stipendiums fertigte ich die vorliegende Arbeit an.